



UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
BARCELONATECH
Escola d'Enginyeria de Barcelona Est

TREBALL FI DE GRAU

Grau en Enginyeria Química

**ESTUDI I SIMULACIÓ DE PROCESSOS DE DESSALINITZACIÓ
D'AIGÜES AMB ELEVADES SALINITATS MITJANÇANT
ELECTRODIÀLISIS**



Memòria i Annexos

Autor:	Mohamed El Madani Ouedchaib
Director:	Jose Luis Cortina Pallas
Co-Director:	Julio López Rodríguez
Convocatòria:	Juny 2020

Resum

La dificultat d'accés o l'esgotament de fonts d'aigua potable ha fet que la recerca busqui noves formes d'obtenir aigua potable. Entre els mètodes més comuns, destaca l'ús d'evaporadors, però degut al seu alt cost en termes d'energia, altres tecnologies, com les de membrana han guanyat importància. Dins d'aquest grup es troba l'electrodiàlisi. Aquesta fa servir membranes de bescanvi catiònic (permeten el pas de cations) i aniònic (permeten el pas d'anions) que, a partir de l'aplicació d'un potencial elèctric, té lloc la separació de ions. Finalment, a partir d'una salmorra, és possible obtenir un corrent concentrat i un altre d'aigua amb baixes concentracions de sals.

Amb aquest projecte s'ha estudiat el transport de ions en dissolució en l'electrodiàlisi a partir dels principals fenòmens de transport que tenen lloc (difusió i migració elèctrica) per determinar consums energètics, capacitat de dessalació i concentracions a la sortida, entre altres. Per realitzar aquest estudi, s'ha avaluat la influència de paràmetres com la concentració de sal inicial, la velocitat (o cabal) a dins del mòdul i el voltatge. A més a més, s'han modelitzat diverses configuracions per comparar-les, com per exemple: un sol pas a voltatge constant, *feed-and-bleed* i *batch*.

S'ha observat que amb les distintes configuracions d'electrodiàlisi seria possible dessalar el corrent inicial per més d'un 90%, fent possible l'obtenció d'aigua potable a partir d'una salmorra. A més a més, s'ha vist la influència que poden tenir els paràmetres d'operació. Un augment del voltatge permet un major flux d'aigua i de sal a través de la membrana, amb el que seria possible obtenir un corrent amb una salinitat més baixa. Malgrat això, el cost específic (kWh/m³) augmentaria considerablement. Pel que fa al cabal, majors velocitats limiten la capacitat de dessalació degut als baixos temps de residència a dins del mòdul.

Resumen

La dificultad de acceso o el agotamiento de Fuentes de agua potable ha hecho que la investigación busque nuevas formas de obtener agua potable. Entre los métodos más comunes, destaca el uso de evaporadores, pero debido a su alto coste en términos de energía, otras tecnologías, como las membranas han ganado importancia. Dentro de este grupo se encuentra la electrodiálisis. Esta utiliza membranas de intercambio catiónico (permiten el paso de cationes) y aniónico (permiten el paso de aniones) que, a partir de la aplicación de un potencial eléctrico, tiene lugar la separación de iones. Finalmente, a partir de una salmuera, es posible obtener una corriente de concentrado y otro de agua con bajas concentraciones de sales.

Con este proyecto se ha estudiado el transporte de iones en disolución en la electrodiálisis a partir de los principales fenómenos de transporte que tienen lugar (difusión y migración eléctrica) para determinar consumos energéticos, capacidad de desalación y concentraciones a la salida, entre otros. Para realizar este estudio, se ha evaluado la influencia de parámetros como la concentración de sal inicial, la velocidad (o caudal) dentro del módulo y el voltaje. Además, se han modelizado varias configuraciones para su posterior comparación, como por ejemplo: de un solo paso a voltaje constante, *feed-and-bleed* y *batch*.

Se ha observado que con las distintas configuraciones de electrodiálisis sería posible desalar la corriente inicial por más de un 90%, haciendo posible la obtención de agua potable a partir de una salmuera. Además, se ha visto la influencia que pueden tener los parámetros de operación. Un aumento del voltaje permite un mayor flujo de agua y de sal a través de la membrana, con ello sería posible obtener una corriente con una salinidad más baja. Sin embargo, los costes específicos (kWh/m^3) aumentarían considerablemente. En cuanto al caudal, mayores velocidades limitan la capacidad de desalación debido a los bajos tiempos de residencia dentro del módulo.

Abstract

The difficulty of access or the depletion of drinking water Sources has made the research look for new methods of drinking water. Among the most common methods is the use of evaporators, but due to its high cost in terms of energy, other technologies, such as membranes have gained importance. Within this group we find the electrodialysis. This uses cation-exchange membranes (allow the passage of cations) and anionic (allow the passage of anions), which, from the application of an electrical potential, takes place the separation of ions. Finally, from a brine, it is possible to obtain a stream of concentrated and other water with low concentrations of salts.

With this project we have studied the transport of ions in solution in the electrodialysis and from the major transport phenomena that take place (diffusion and migration electric) to determine energy consumption, desalination capacity, and concentrations at the outlet, among others. Pear to carry out this study, we assessed the influence of parameters such as salt concentration, initial velocity (or flow rate) within the module, and voltage. In addition, we have modelled several configurations for later comparison, as for example: single-step constant voltage feed-and-bleed and batch.

It has been observed that with the various configurations of electrodialysis would be possible to desalt the initial current by more than 90%, making it possible to obtain potable water from a brine. Furthermore, it has been the influence of the operating parameters. An increase in voltage allows for a greater flow of water and salt through the membrane, it would be possible to obtain a current with a salinity lower. However, the specific costs (kWh/m^3) would increase considerably. In terms of the flow, higher speeds, limiting the capacity of desalination due to the low residence times within the module.



Agraïments

Per començar, voldria agrair a la meva família, en especial a la meva mare, que ha fet possible que estigui aquí escrivint aquestes línies. Ells m'han donat suport sempre en els moments més difícils de la carrera.

A Jose Luis Cortina i Julio Lopez tutors del treball de fi de grau, per el constant suport, l'orientació i la confiança d'acompanyar-me durant la trajectòria del projecte.

Als meus pares, les meves germanes i a tota la meva família per l'alleugeriment de la feixuguesa del camí, per l'assessorament i el suport donat durant l'etapa acadèmica.

I com no, voldria donar les gracies als meus amics, aquells que han estat sempre donant-me suport i consells, especialment en els moments difícils.

A tots vosaltres, moltes gràcies.



Índex

RESUM	I
RESUMEN	II
ABSTRACT	III
AGRAÏMENTS	V
1. PREFACI	1
1.1. Origen del treball	1
1.1. Motivació.....	1
2. INTRODUCCIÓ	3
2.1. Objectius del treball	3
2.2. Abast del treball	3
3. INTRODUCCIÓ I TECNOLOGIES DE DESSALINITZACIÓ D'AIGÜES	5
3.1. Dessalinització	5
3.2. Tecnologies de dessalinització	6
3.2.1. Procediments tèrmics.....	6
3.2.2. Procediments de membrana.....	9
4. FONAMENTS TEÒRICS DELS PROCESSOS D'ELECTRODIÀLISI	12
4.1. Introducció a la electrodiàlisi	12
4.2. <i>Stack</i> de membranes	13
4.2.1. Membrana de bescanvi iònic	14
4.2.2. Espaiadors.....	15
4.2.3. Elèctrodes	16
4.2.4. Juntres	17
4.3. Principis electroquímics de l'electrodiàlisi	18
4.3.1. Llei de Faraday	19
4.3.2. Llei de Fick.....	19
5. MODELITZACIÓ DELS DIFERENTS TIPUS DE DESSALINITZACIÓ MITJANÇANT L'ELECTRODIÀLISI	22
5.1. Introducció	22
5.2. Modelització del cas <i>Single-Pass (Continuous)</i>	22
5.2.1. Estructura y funcionament.....	22

5.2.2.	Especificacions i condicions d'operació	24
5.2.3.	Equacions de transport de matèria	25
5.2.4.	Concentració de sal i velocitat en les cel·les dessaladores	27
5.2.5.	Concentració de sal i velocitat en les cel·les de concentrat.....	29
5.2.6.	Propietats físiques de la dissolució en les cel·les dessaladores i en les cel·les de concentració.....	31
5.2.7.	Resistència elèctrica d'un parell de membranes bescanvi iònic i dissolucions en cel·les dessaladores i de concentració:	32
5.2.8.	Caiguda de pressió en les cel·les dessaladores, concentració i ranures	33
5.2.9.	Distribució de la densitat de corrent	35
5.2.10.	Coeficients en les equacions de distribució de la densitat i el coeficient de uniformitat.	40
5.2.11.	Voltatge de la cel·la, consum d'energia, recuperació d'aigua i raó de dessalinització	40
5.2.12.	Limitació de la densitat de corrent:	42
5.2.13.	Punts de decisió	44
5.3.	Simulació 2: <i>Feed-and-Bleed</i>	46
5.3.1.	Estructura i funcionament	46
5.3.2.	Balanç de matèria i consum d'energia en el procés <i>Feed-and-Bleed</i> :	47
5.3.6.	Punts de decisió	49
5.4.	Programa Batch	52
5.4.1.	Esquema i funcionament	52
5.4.4.	Especificacions i condicions d'operació:.....	53
5.4.5.	Funcionament de la cel·la de membranes, Pas 1:	53
5.4.6.	Relació entre el temps d'operació i el funcionament de la cel·la de membranes, Pas 2:	55
5.5.	Programa de dessalinització per la producció de sal i conservació del medi marí	58
5.5.1.	Estructura y funcionament	58
5.5.2.	Concentració de sal i velocitat de la dissolució en les cel·les.....	59
5.5.3.	Fuites de corrent elèctric	60
5.5.4.	Punts de decisió	62
6.	Execució dels models. Anàlisi i discussió dels resultats	64
6.1.	Resultats del algoritme de simulació de la configuració de voltatge constant d'un sol pas (<i>single-pass continuous</i>)	64
6.2.	Resultats del algoritme de simulació de la configuració " <i>feed-and-bleed</i> "	70
6.3.	Resultats del algoritme de simulació de la configuracion " <i>Batch</i> "	72

6.3.1.	Estudi del efecte del voltatge	72
6.3.2.	Estudi de l'efecte de la concentració inicial	74
6.4.	Resultats del algoritme de dessalinització per la producció de sal a partir de salmorres de desolació de aigua de mar mitjançant osmosi inversa.	76
6.4.1.	Comparació del resultats de la simulació amb dades experimentals	78
7.	Estudi comparatiu de algorismes de simulació per les configuracions "Feed-and-Bleed" i "Batch"	80
8.	ANÀLISI DE L'IMPACTE AMBIENTAL DEL PROJECTE: MATRIU DE LEOPOLD _	83
9.	CONCLUSIONS I PROPOSTA DE CONTINUÏTAT _____	85
10.	PRESSUPOST I ANÀLISI ECONÒMIC _____	87
10.1.	Recursos materials	87
10.2.	Recursos humans	87
10.3.	Cost total	88
11.	BIBLIOGRAFÍA _____	91

1. Prefaci

1.1. Origen del treball

L'aigua és un bé essencial per a la vida, és un dels recursos més abundants en la Terra, cobrint aproximadament un 70% de la superfície terrestre. Encara que cobreixi la major part de la Terra, existeix una greu escassetat d'aigua potable en molts països del món, principalment en països en desenvolupament i països de la regió de l'Orient Mitjà. La raó per la qual es pateix aquesta situació és deguda a que quasi el 97,5% de l'aigua de la Terra és aigua salada present en els oceans i el 2,5% restat és aigua dolça en forma d'aigua subterrània, muntanyes de gel, llacs i rius, que serveix la majoria de les necessitats humanes i animals.

Els recursos d'aigua potable estan en davallada i la demanda d'aigua cada vegada és més alta. En les últimes dècades, diverses activitats industrials i de desenvolupament han donat lloc a un augment de la contaminació i al deteriorament de la qualitat de l'aigua. Per tant, l'escassetat de l'aigua i la seva poca qualitat es consideren obstacles importants pel desenvolupament sostenible de la societat.

Els recursos hídrics existents estan disminuint degut a la distribució desequilibrada de l'aigua de pluja, la sequera, l'explotació extrema dels recursos d'aigua subterrània i el creixement constant de la població

Per aquestes raons, la dessalinització és una alternativa per resoldre carències en la disponibilitat i qualitat de l'aigua. El seu caràcter flexible fa possible adaptar-se a canvis en les necessitats oferint solucions de forma independent.

S'han desenvolupat diferents processos de dessalinització, alguns d'ells estan actualment en investigació i desenvolupament, entre aquests, la dessalinització mitjançant l'electrodiàlisi (ED) que és el motiu d'aquest projecte.

1.1. Motivació

Amb l'objectiu de profunditzar en l'estudi del procés de l'electrodiàlisi enfocat en la dessalinització d'aigües, es decideix elaborar un model matemàtic que permetrà conèixer el comportament del sistema davant de diferents situacions, així com determinar les condicions òptimes de treball sense la necessitat de portar a terme llargs i costosos experiments.

La implantació del model, mitjançant una sèrie d'algoritmes de càlcul, es realitza utilitzant software de full de càlcul, en concret, Microsoft Excel. Si els resultats obtinguts pel model ja validat s'ajusten a les expectatives previstes, l'electrodiàlisi podria contemplar-se com una tecnologia viable per la dessalinització d'aigües amb elevades salinitats. Amb aquest propòsit, s'inicia el Treball Final de Grau aquí presentat.

2. Introducció

2.1. Objectius del treball

El present projecte té com a objectiu estudiar i simular el comportament d'un procés de dessalinització d'aigües amb elevades salinitats mitjançant electrodiàlisi. El model matemàtic que es presenta recull els principals fenòmens electroquímics que tenen lloc dins del *stack*, donades unes determinades condicions inicials permeten obtenir el perfil de concentracions de sortida, estimar el temps necessari per arribar a nivells de concentració desitjats i calcular el consum energètic requerit

És també objectiu d'aquest projecte la realització de diferents simulacions tenint en compte la gran varietat de sistemes i configuracions possibles per la dessalinització mitjançant electrodiàlisi, així doncs, es tindran diferents eines per predir el comportament.

Per finalitzar, es pretén realitzar un anàlisi dels resultats obtinguts per poder concloure les condicions i comprovar si el producte obtingut és de la qualitat desitjada, en el seu cas es ratificaria l'opció d'emprar l'electrodiàlisi com a mètode eficaç i competitiu per la dessalinització.

El poder disposar d'eines com les desenvolupades amb aquest estudi té un valor molt important en les etapes de disseny i projecció de etapes de desalació d'aigua de elevada salinitat per: i) la producció d'aigua de boca o ii) en processos de tractament de corrents de elevada salinitat per promoure la recuperació de minerals d'aquestes dissolucions.

2.2. Abast del treball

Les simulacions s'han realitzat agafant com a referència el treball desenvolupat pel Japó durant quatre dècades en la producció de sal de taula a partir d'aigua de mar fent servir electrodiàlisi. El treball experimental i a nivell industrial, fa ser solidificat en forma d'eines de càlcul pel Dr. Y. Tanaka [5]. Aquest TFG ha utilitzat la base científica d'aquest model i mes important paràmetres de les dissolucions en base a NaCl, electròlit principal del aigua de mar. El treball ha definit una sèrie de escenaris o aplicacions d'interès en base a etapes de tractament amb ED i s'han desenvolupat algoritmes per descriure les etapes de separació i concentració estudiades. .

A més, els algoritmes desenvolupats, en base a Excel, han permet simular la desolació o la concentració de dissolucions riques en NaCl. Així ha sigut possible estudiar l'evolució de la concentració del NaCl, component majoritari en la salmorra, menyspreant l'efecte dels ions restants en els mecanismes de transport i de la termodinàmica del procés.



3. Introducció i tecnologies de dessalinització d'aigües

3.1. Dessalinització

La dessalinització és un procés físic-químic que consisteix en eliminar la sal de l'aigua de mar o salmorres, obtenint aigua potable.

En els seus inicis, el procés de dessalinització d'aigües es realitzava mitjançant l'evaporació, l'aigua s'escalfava fins a evaporar-se i posteriorment es condensava per obtenir aigua sense sals. Però mitjançant aquest procés es consumien grans quantitats d'energia, pel qual fet els costos de producció de l'aigua obtinguda resultaven bastant elevats. Aquest preu, va motivar als investigadors i empreses a buscar alternatives. Actualment i, gràcies als grans avenços tecnològics, s'ha aconseguit reduir considerablement el consum energètic i per tant, el cost de l'aigua dessalinitzada [8].

Els sistemes de dessalinització utilitzats fins ara es classifiquen en dos grans grups segons el tipus de procés de separació en el que es basen: processos tèrmics i de tecnologies de membrana com es pot observar en la figura 1. Segons el tipus d'aigua a tractar s'empren uns processos o uns altres: ja sigui aigua del mar, industrial o residual; les condicions de treball, com per exemple la pressió i la temperatura; la font d'energia, que pot ser de vapor, energia elèctrica o mecànica o mitjançant l'ús d'energies renovables [8].

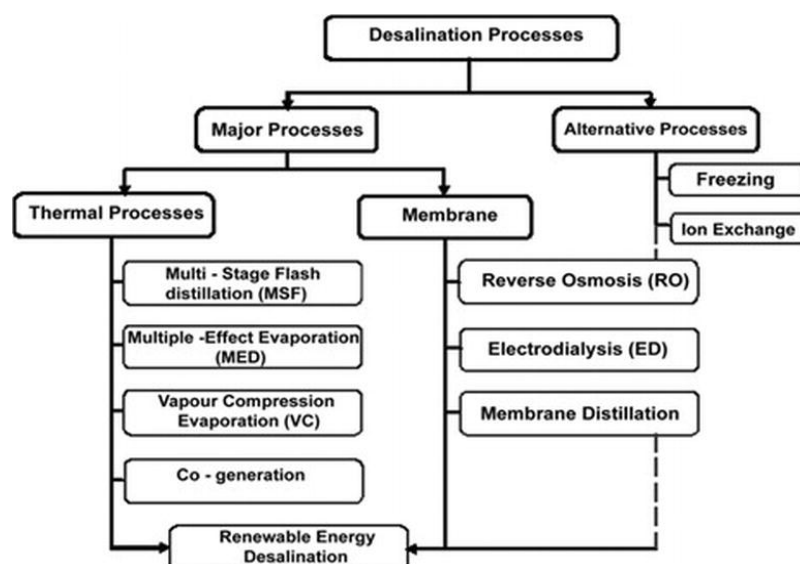


Figura 1. Esquema dels processos de dessalinització. [1]

3.2. Tecnologies de dessalinització

3.2.1. Procediments tèrmics

La dessalinització mitjançant evaporació consisteix en l'evaporació d'aigua salina i la seva posterior condensació per obtenir aigua dessalinitzada. Els sistemes dessalinitzadors acostumen a treballar a pressions més baixes que la pressió atmosfèrica amb l'objectiu de reduir el consum energètic i, per tant, es necessiten uns sistemes de bombes i un sistema per l'extracció d'aire i gasos no condensables [1]

Aleshores, el procés de dessalinització implica tres etapes:

- Evaporació deguda a l'addició de calor a una massa determinada d'aigua salada.
- Separació del vapor amb el líquid provinent.
- Condensació del vapor

Els processos de dessalinització tèrmica es subdivideixen en els següents:

- Evaporació instantània de etapes múltiples (MSF).
- Evaporació multiefecte (MED)
- Evaporació per compressió de vapor (VCD)

3.2.1.1. Evaporació instantània de etapes múltiples (MSF)

El principi del procés d'evaporació instantània en etapes múltiples, també conegut com a procés multietapa flash (MSF), és el procés més antic en l'àmbit industrial i el dia d'avui molt estès en quant a capacitat de producció en el món [1]. A la figura 2 es representa el sistema d'evaporació MSF.

El principi del procés es basa en l'ebullició de l'aigua en un evaporador amb diverses etapes que operen a temperatures i pressions progressivament decreixents, així s'aconsegueix evaporar aigua en cada una de les etapes per portar el conjunt de la producció total [1].

Aquest mètode es basa en el principi de reduir de manera instantània la pressió de l'aigua de mar per sota del seu valor de pressió de vapor d'equilibri. D'aquesta manera, s'aconsegueix una evaporació imminent i explosiva. Un percentatge petit de l'aigua s'evapora, de manera que la producció de la planta s'aconsegueix mitjançant etapes successives que funcionen a pressions que es redueixen progressivament [1].

L'aigua d'alimentació prèviament és escalfada a temperatura d'ebullició, en una càmera flash a través d'un orifici, d'aquesta manera es provoca una caiguda de pressió suficient perquè sigui menor a la de saturació a la mateixa temperatura, evaporant part de l'aigua [1].

El vapor produït circula a través d'uns filtres on es separa de les gotes de salmorra que arrossega [1].

Seguidament, el vapor es condensa sobre la superfície dels tubs d'alimentació de la planta

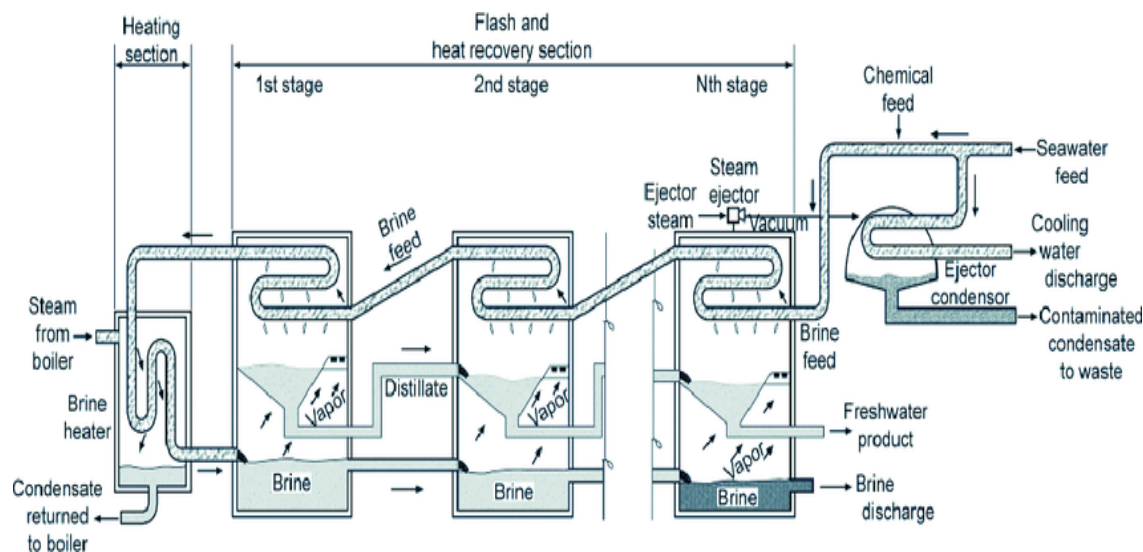


Figura 2. Esquema d'evaporació instantània de etapes múltiples (MSF). [1]

Els principals avantatges de la MSF són la simplicitat i facilitat en la seva construcció, ja que no tenen parts mòbils, a part de les bombes convencionals. La qualitat de l'aigua produïda conté entre 2 i 10 mg/L de sòlids dissolts tenint en compte que la salinitat de l'aigua del mar és de aproximadament de 35000 mg/L el que significa un alt nivell de purificació [1].

D'altra banda, el principal desavantatge és l'elevada quantitat d'energia tèrmica i mecànica necessària per operar. A més a més, l'agregació de més etapes milloraria l'eficiència augmentant la producció d'aigua, però incrementant també, el cost i la complexitat operativa [1]

3.2.1.2. Evaporació multiefecte (MED)

El procés d'evaporació multiefecte (MED) s'ha utilitzat des de principis dels anys setanta. La destil·lació multiefecte empra els mateixos principis que la destil·lació instantània de múltiples etapes, però al contrari, té lloc en una sèrie d'evaporadors col·locats en sèrie. El vapor d'una de les cel·les s'utilitza per evaporar l'aigua mentre que l'aportació energètica es realitza sobre la primera cel·la o etapa [1]. La representació del sistema s'il·lustra en la figura 3.

La principal diferència entre el procés MED i MSF radica en la forma en la qual es desenvolupa l'evaporació. Les plantes de MED utilitzen diversos evaporadors amb pel·lícula prima, i l'evaporació es produeix de forma natural en una cara dels tubs d'un intercanviador aprofitant la calor latent per la condensació del vapor en l'altra cara d'aquest. Així, s'aconsegueixen millors coeficients de transferència de calor que amb els que s'obtenen en el mètode MSF on es produeix l'evaporació de manera directa [1]

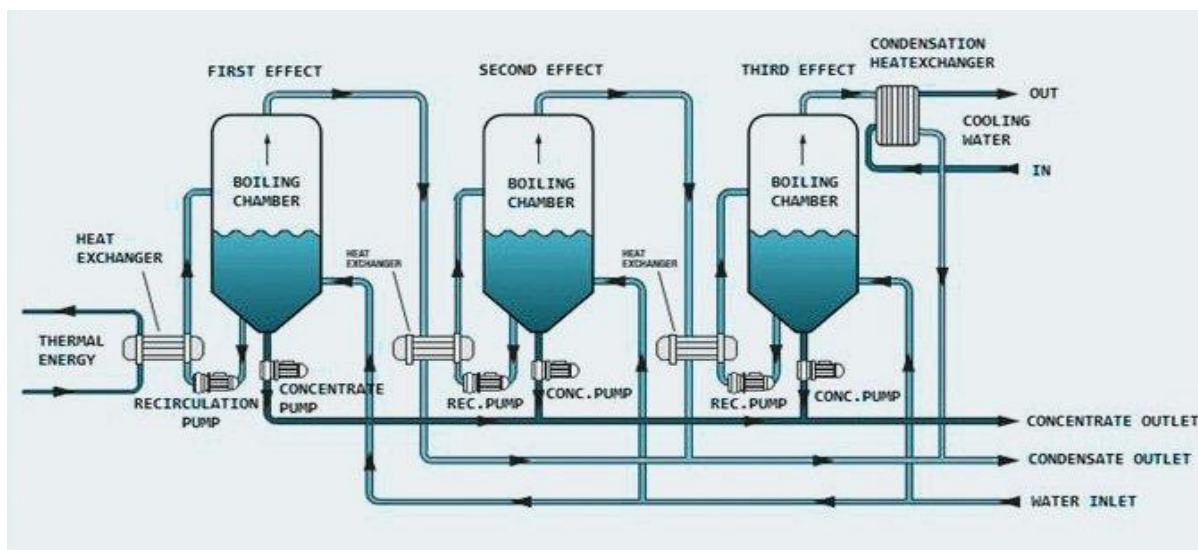


Figura 3. Esquema de dessalinització per evaporació multiefecte (MED). Font: [1]

Els principals avantatges de la destil·lació multiefecte són el baix risc de corrosió i formació d'incrustacions en la superfície, ja que està dissenyat per funcionar a temperatures més baixes de 70°C, els costos del pre-tractament i d'operació, el baix consum d'energia en comparació amb la tecnologia MSF tenint, a més a més, un rendiment més alt. Per tant, la tecnologia MED es pot considerar més rentable i eficient [1]

3.2.1.3. Evaporació per compressió de vapor (VCD)

El sistema d'evaporació per compressió de vapor (VCD) consisteix en evaporar aigua del mar, augmentant la temperatura de condensació dels vapors mitjançant un compressor i la seva posterior condensació en un intercanviador de calor, refredat amb la mateixa aigua evaporada. En aquest procés, la calor per evaporar l'aigua d'alimentació prové de la compressió del vapor i no de l'intercanvi directe de calor del vapor produït en una caldera [1]. A la figura 4 es representa el sistema VCD.

L'evaporació es produeix a la part més baixa de la càmera, després d'haver realitzat l'eliminació dels gasos no condensables, en aquest cas, l'aire, mitjançant una bomba o injector de buit. Els vapors extrets pel compressor es recirculen per l'interior dels tubs condensadors [1].

En condensar els vapors, l'aigua dolça obtinguda s'extreu del evaporador amb una bomba. Per mantenir la salinitat constant en l'interior de l'evaporador, una part de la salmorra refrigerada es retorna al mar. Per compensar la salmorra i producte extrets s'ha d'introduir aigua del mar. Com que l'aigua del mar és freda i la salmorra i el producte és calent, se'ls fa passar per un intercanviador i així es recupera gran part d'energia calorífica [1].

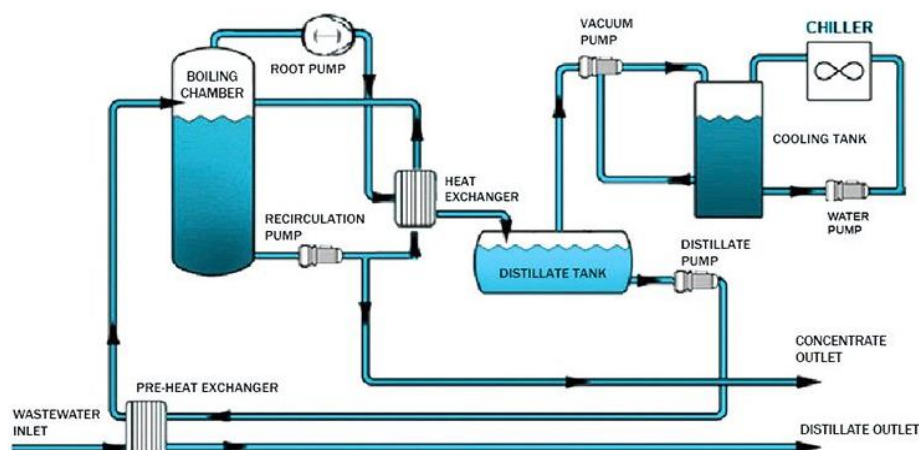


Figura 4. Esquema de dessalinització per compressió del vapor (VCD). [1]

Els principals avantatges del sistema VCD són la seva simplicitat i fiabilitat, la baixa temperatura de funcionament, per tant, una major eficiència en termes energètics. A més a més, es redueix la possibilitat de formació d'incrustacions i corrosió dels tubs [1].

Els desavantatges són el fet de no poder tractar un cabal més gran que 3000m³/dia i generalment s'utilitza per hotels, centres turístics, entre d'altres [1].

3.2.2. Procediments de membrana

Els processos de dessalinització mitjançant membranes són de gran importància en l'actualitat. Les membranes actuen com una barrera selectiva, permetent el pas de certs components i retenint d'altres [1].

Quan una membrana separa dues fases fluides, diferents tipus de forces poden ser la causa del flux de molècules o espècies iòniques a través d'elles. Aquestes s'anomenen forces impulsores, i poden ser mecànica, química, elèctrica o tèrmica [1]

Alguns processos de dessalinització per membrana, es descriuen a continuació:

- Osmosi inversa
- Electrodiàlisis

3.2.2.1. Osmosi inversa

En comparació amb altres processos, l'osmosi inversa és la principal font per obtenir aigua potable en zones amb problemes d'abastament d'aigua per consum humà [1].

L'osmosi és un fenomen natural pel qual l'aigua d'una dissolució de baixa concentració de sal flueix cap a una solució més concentrada a través d'una membrana semipermeable fins a igualar les salinitats. Quan s'aplica pressió (superior a la pressió osmòtica del sistema) a la dissolució de major concentració de sal, és produeix la migració de l'aigua des de la part de concentrat cap a la part de diluït, retenint així la sal en la solució concentrada. Això es coneix com a procés d'osmosi inversa [1].

A les plantes dessaladores basades en l'osmosi inversa, s'utilitza una salmorra com aigua d'alimentació obtenint un corrent d'aigua producte i un corrent de salmorra concentrada. L'aigua produïda (pobre en sals dissoltes) passa per un procés de mineralització i cloració, s'emmagatzema en dipòsits i s'envia a la xarxa de distribució pel seu consum. La salmorra concentrada és diluïda abans de ser retornada al mar per evitar altes concentracions de sal que poden arribar a ser nocives per l'ecosistema. Les pressions d'operació varien entre els 25 i 35 bar quan la salinitat és de 4,5% i la temperatura es de 30°C [1].

Les configuracions dels mòduls de membranes més utilitzades a nivell industrial són les de fibra buida i, les espirals. Unes altres dues configuracions (utilitzades més a escala laboratori) són les tubulars i les de plat i marc.

Una planta dessalinitzadora d'osmosi inversa es compon principalment per quatre sistemes com es pot observar en la figura 5:

- Sistema de pre-tractament.
- Bombes d'alta pressió.
- Sistema de membrana.
- Tractament posterior

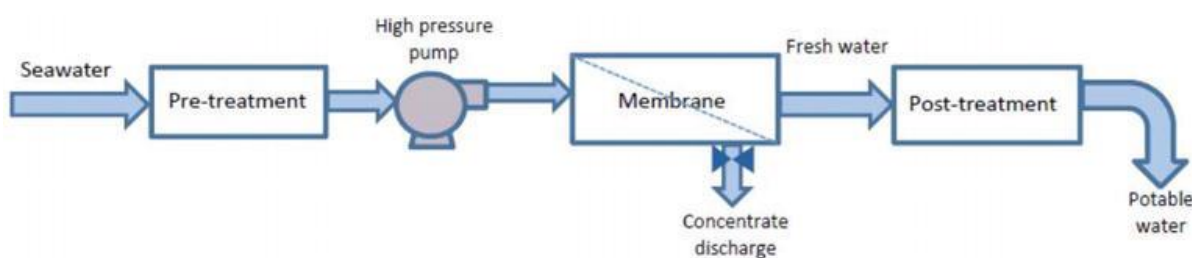


Figura 5. Esquema de dessalinització per osmosi inversa. [1]

El principal avantatge de l'utilització de l'osmosi inversa per la dessalinització és la menor corrosió dels metalls en comparació amb els processos MSF i MED comentats anteriorment, degut a les condicions de temperatura ambient [1].

Els principals desavantatges és l'elevat cost d'instal·lació i el cost energètic en comparació amb l'utilització de l'electrodiàlisi. [1]

3.2.2.2. Electrodiàlisi

L'electrodiàlisi o ED és una tecnologia de membranes de bescanvi iònic utilitzada per separar substàncies iòniques dissoltes. És un procés de membranes en el que els ions són transportats a través d'una membrana d'intercanvi iònic utilitzant l'energia elèctrica com força impulsora. Entre les diverses aplicacions que ofereix, la dessalinització d'aigües salobres és la que presenta un major ús industrial [4].

Des de 1960, Asahi Glass Company i Astom Corporation exploten industrialment el procés de dessalinització d'aigües mitjançant l'electrodiàlisi, ja que es tracta d'un procés ràpid i té un cost operacional i consum energètic moderat. En països com Japó, Taiwan o Corea del Sud, l'electrodiàlisi s'ha empleat per produir sal de taula a partir d'aigua del mar. També s'ha utilitzat per obtenir diverses sals a partir de la salmorra de rebuig en les indústries mineres de Polònia o en processos d'aprofitament integral d'aigua de mar. En l'actualitat, s'estudia l'ús en la reutilització de salmorra poc concentrada com a matèria primera dels processos d'electròlisi en diferents indústries, com pot ser, la indústria del cloro-alcali on les necessitats de sal s'han cobert mitjançant processos de dilució de sal sòlida en aigua fins a l'obtenció d'una dissolució saturada (300g/L) [4].

A més de l'electrodiàlisi, com s'ha esmentat amb anterioritat, existeixen altres tecnologies que permeten concentrar una solució salina, com poden ser les diferents tècniques d'evaporació. No obstant això, cada una d'elles presenta algun inconvenient que les fa menys aptes que la (ED). Un inconvenient és l'alta energia que s'ha de subministrar a processos d'evaporació per obtenir les concentracions desitjades de salmorra (250-300g/L), el que suposaria un gran consum energètic [4].

L'electrodiàlisi presenta una sèrie d'avantatges respecte a l'osmosi inversa: el cicle de vida és més elevat gràcies a la major resistència química i mecànica; les temperatures d'operació poden arribar als 50°C; l'afectació per les incrustacions és menor; es requereix un menor pre-tractament de l'alimentació degut a que l'electrodiàlisi té la capacitat d'operar en diferents condicions d'entrada, ja sigui diferents velocitats i concentracions d'entrada de la dissolució, temperatura d'operació, entre d'altres; posseeix una major tolerància a alts nivells de clorur i pH el fet que provoca una major retenció dels electròlits; finalment, el procés es pot ajustar a la concentració d'alimentació més fàcilment i la parada i posada en marxa és més senzilla [4].

Per concentracions d'alimentació superiors a 10 g/L es considera més econòmic utilitzar l'osmosi inversa degut a l'increment del consum energètic. Per una altra banda, l'emissió de clor pot generar corrosió als voltants [4].

Degut als avantatges que presenta l'electrodiàlisi respecte a l'osmosi inversa, es realitza l'estudi de dessalinització d'aigües amb elevades salinitats mitjançant l'electrodiàlisi.

4. Fonaments teòrics dels processos d'electrodiàlisi

4.1. Introducció a la electrodiàlisi

L'electrodiàlisi és tracta d'una tècnica de separació basada en bescanvi selectiu de ions dissolts a través de membranes de bescanvi iònic per acció d'un camp elèctric continu.

Les membranes poden ser de dos tipus, una selectiva als cations (Na^+ , K^+ , NH_4^+ , Ca^{2+}) anomenades membranes de bescanvi catiònic; i l'altre tipus és selectiva als anions (Cl^- , NO_3^-), anomenades membranes de bescanvi aniònic. Les membranes estan disposades de forma alternada, és a dir, una membrana catiònica i a continuació una membrana aniònica, novament una catiònica i així successivament format el que es coneix com el mòdul de electrodiàlisi. Entre cada parell de membranes es col·loca un separador que consisteix en una malla que proporciona canals de flux a través dels quals flueixen les dissolucions, creant turbulència que millora la transferència de ions i, a més, serveix de suport de les membranes [4].

A l'establir un camp elèctric en una cel·la de membranes, els ions migren cap a l'ànode o càtode segons la seva càrrega respectiva. Degut a la disposició de les membranes, apareixen compartiments on les dissolucions de l'electròlit s'empobreix i d'altres on l'electròlit es concentra. Els cations que es troben en un compartiment de diluïts migren per l'efecte del camp elèctric cap al càtode, trobant-se en primer lloc una membrana catiònica, que permet el seu transport. Llavors, passen al compartiment adjacent on, en el seu camí cap al càtode, es troben amb una membrana aniònica que impedeix el seu pas, el que fa que quedin retinguts en aquest compartiment. Per altra banda, els anions migren cap a l'ànode, trobant-se una membrana aniònica que poden travessar per entrar en un compartiment de concentrats. Aquí es trobarien amb una membrana catiònica que no permet el seu transport, quedant retinguts en aquest compartiment [4].

A la figura 6 s'esquematitza una unitat d'electrodiàlisi o *stack* de membrana de dos compartiments amb l'objectiu d'il·lustrar el funcionament del procés. Com s'ha mencionat, consta d'un conjunt de membranes de bescanvi iònic disposades alternativament entre dos elèctrodes, de manera que donen lloc a dos compartiments. Pel compartiment diluït (D) circula la dissolució que cal extreure'n els ions, i pel concentrat (C), la dissolució en la qual aquests ions es concentren [4]

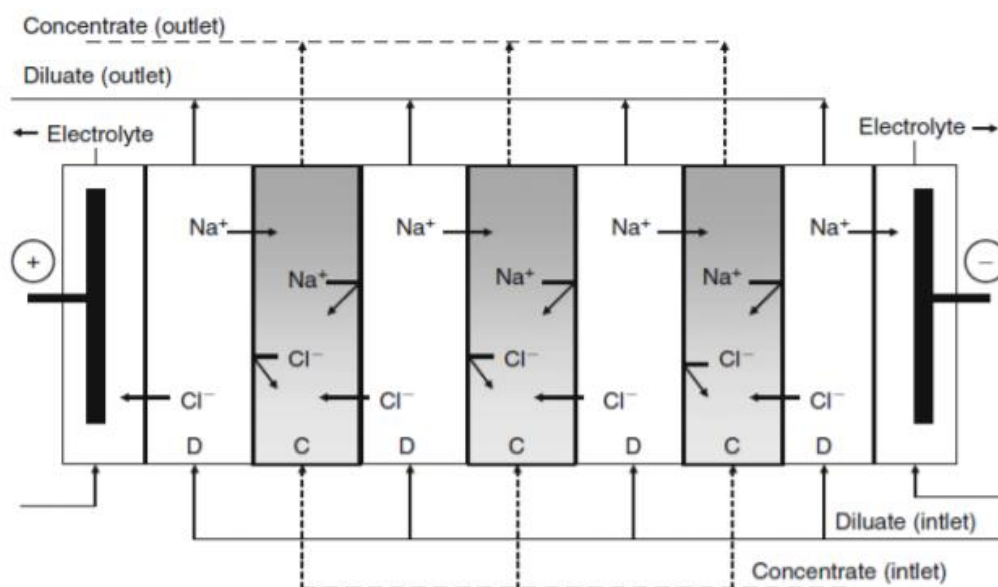


Figura 6. Esquema d'un stack. Font[1]

4.2. Stack de membranes

Una secció repetitiva del *stack*, anomenada *parell de cel·les*, està composta per una membrana de bescanvi catiònic, un espaiador de flux d'aigua concentrada, una membrana de bescanvi aniònic, i, un espaiador de flux d'aigua diluïda (o desmineralitzada). Als extrems del *stack* de la ED, es col·loquen els elèctrodes [4].

La figura 7 mostra els diferents elements funcionals del *stack* que s'han anat mencionat al llarg del capítol i en els següents apartats es detallen les seves principals característiques.

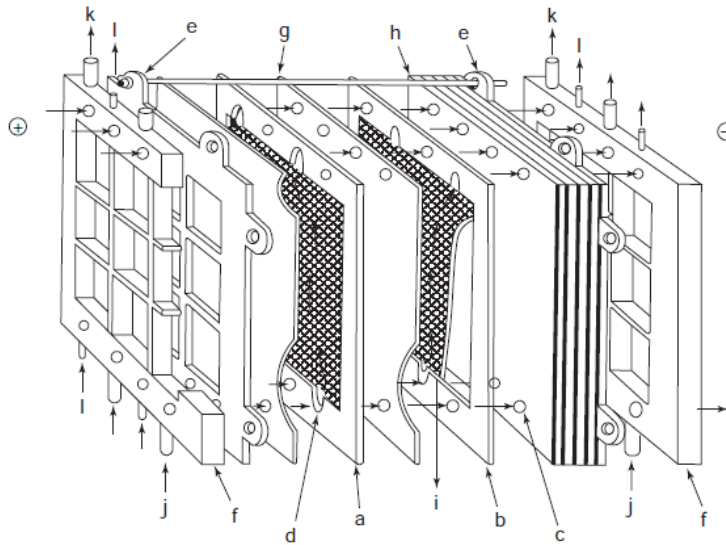


Figura 7. Estructura d'un stack. a) Cel·la de dessaladora; b) Cel·la de concentració; c) Col·lector; d) Ranura; e) Marc de fixació; f) Marc d'alimentació; g) Membrana de bescanvi catiònic; h) Membrana de bescanvi aniònic; i) Espaiador; j) Alimentació; k) Solució dessalinitzada; l) solució concentrada. Font: [5]

4.2.1. Membrana de bescanvi iònic

Les membranes de bescanvi iònic són membranes sintètiques permeables a ions positius o negatius en dissolució, posseeixen una bona resistència mecànica i, una bona estabilitat química i biològica. Les membranes són insolubles en dissolució aquosa i presenten una baixa resistència elèctrica, amb la finalitat de garantir que la intensitat de corrent circuli a través del stack, és necessita una potencial suficientment alt per provocar la migració dels ions des de la corrent diluïda a la concentrada.

Químicament, aquestes membranes són resines bescanvi iònic de forma laminar amb un espessor d'entre 0,15 i 0,6 mm. Existeixen membranes de bescanvi iònic orgàniques (polimèriques) i inorgàniques. A dia d'avui, les utilitzades a escala industrial són les primeres, per això, el present projecte, es centrarà exclusivament en les mateixes [4]

Tal com s'ha comentat en la introducció a aquest capítol, les membranes tenen selectivitat segons a la càrrega iònica i es divideixen en membranes de bescanvi catiòniques i aniòniques. Aquesta selectivitat és conseqüència de la presència de càrregues iòniques fixades en la matriu de la membrana. Les membranes de bescanvi catiònic contenen càrregues iòniques negatives fixades en la seva estructura, com s'observa en la figura 8, formades pels grups sulfònics ($-SO_3^-$) o carboxílics ($-COO^-$). En canvi, les membranes de bescanvi aniònic estan formades per grups amb càrregues iòniques positives, generalment grups amoni ($R_1R_2R_3R_4N^+$) [4].

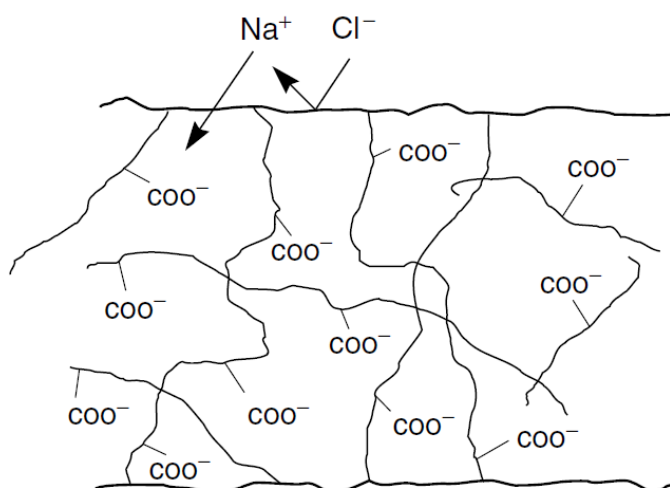


Figura 8. Esquema d'una membrana de bescanvi iònic. [15]

4.2.2. Espaiadors

Els espaiadors són làmines de material plàstic (polietilè o polipropilè) en forma de malla que es col·loquen entre cada parell de membranes. Les funcions són les següents [5]:

- Proporcionar els canals de flux a través dels quals flueixen les dissolucions.
- Actuar com promotors de turbulències i controlar la distribució del flux.
 - Augment del corrent elèctric per unitat d'àrea de la membrana degut a les turbulències creades.
 - Reducció de les incrustacions en les membranes.
- Segellar les cel·les.
- Suportar les membranes.

En l'actualitat existeixen diferents varietats, representats en la figura 9 que es diferencien pel recorregut que la dissolució realitza per l'interior dels compartiments del mòdul.

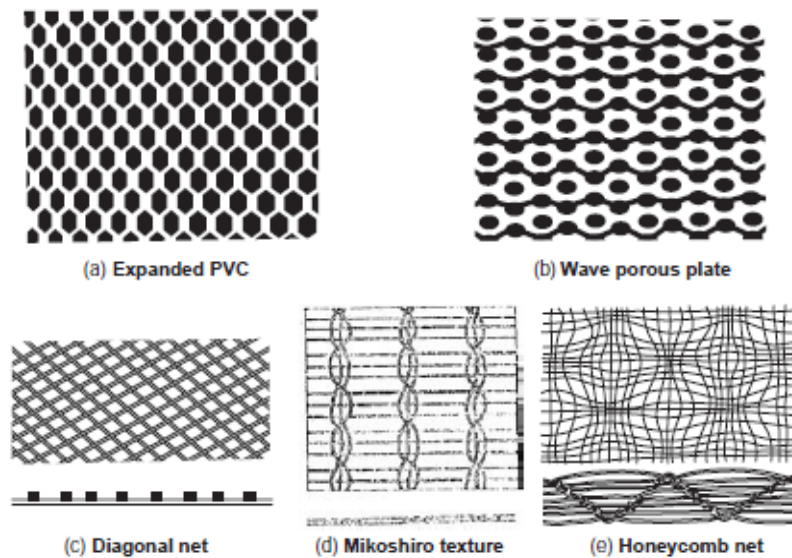


Figura 9. Espaiadors. Font: [5]

Per la realització de l'estudi i simulació del model d'electrodiàlisi, es selecciona un espaiador tenint en compte els següents criteris [5]:

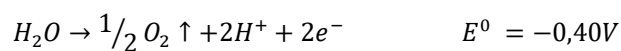
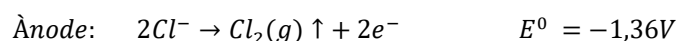
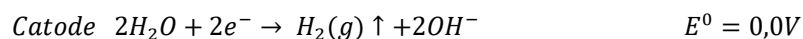
- Baixa pèrdua de càrrega per fricció.
- Baix efecte de detecció de corrent elèctric.
- Descàrrega fàcil d'aire.
- Menor bloqueig del pas de flux de dissolució.

El model emprat per la realització de les pertinents simulacions, escull com a espaiadors els disposats en diagonal, representats com a (c) en la figura 9.

4.2.3. Elèctrodes

Els elèctrodes són materials conductors de l'electricitat, a través dels quals es proporciona el camp elèctric necessari perquè es produeixi el procés de separació. Per tant són ànodes dimensionalment estables com els elaborats amb òxids metàl·lics, per exemple, el diòxid d'estany o Pt/Ti com ànodes, i l'acer inoxidable com a càtode [5].

Un factor que es té en compte és l'ocurrència de reaccions en la superfície dels elèctrodes [5]:



Per minimitzar l'ocurrència de reaccions s'han d'utilitzar solucions de rentat amb electròlits, com el sulfat de sodi, que no s'electrolitzen en les condicions de treball. Amb freqüència les solucions de rentat d'ambdós elèctrodes es mantenen separades, però en general aquests dos corrents es barregen per compensar la diferència de pH generada per les reaccions electròdiques. De la mateixa manera, s'addiciona àcid a aquesta dissolució per evitar la precipitació del calci i magnesi. En les instal·lacions industrials, és important mantenir separats els gasos generats en les reaccions catòdiques i anòdiques, ja que en l'ànode es forma oxigen amb traces de clor i en càtode es forma hidrogen, que al barrejar-se poden originar una combustió incontrolada de l'hidrogen [5].

4.2.4. Junes

La forma de la junta es presenta en la figura 10. La solució es subministra des del col·lector d'entrada col·locat en el fons, flueix a través de la ranura i s'alimenta en la porció de pas de la corrent. A continuació la solució es descarrega a través de la ranura de sortida cap al col·lector instal·lat en la part superior [5]. Les juntes tenen les funcions següents [5]:

- Evitar fuites de solució des de l'interior cap a l'exterior del *stack* o cel·la.
- Ajustar la distància entre una membrana bescanvi catiònic i aniònic.
- Evitar fuites de solució entre una cel·la dessaladora i una cel·la de concentració que es poden produir en les seccions de ranura.

Amb l'objectiu d'evitar les fuites de solució, és convenient que la junta sigui d'un material tou. Per altra banda, és convenient adoptar un material resistent i estable per evitar canvis de dimensió durant l'operació a llarg termini. El material de la junta es selecciona a partir del cautxú, copolímer de l'acetat de vinil, clorur de polivinil, polietilè, etc. L'amplada de la junta és de l'ordre de 0,5-2,0 mm [5].

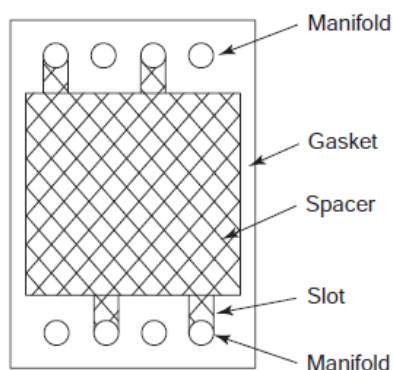


Figura 10. Estructura d'una junta. [5]

4.3. Principis electroquímics de l'electrodiàlisi

En processos d'electrodiàlisi, existeix un moviment de ions com a conseqüència de l'aplicació d'un potencial elèctric (migració iònica). Tot i que existeixen altres mecanismes que també donen lloc al transport de partícules a través del *stack* aquest fenomen ha de tenir en compte que els ions en la dissolució presenten una estructura solvatada, és a dir, formant complexos amb les molècules de dissolvent, en aquest cas, l'aigua. Quan els ions són atrets cap als càtodes, arrosseguen en el seu moviment a les molècules d'aigua que formen part del complex (electro-osmosis) [5].

Tal com s'ha explicat amb anterioritat, la migració dels ions i la disposició de les membranes permeten que les dissolucions als compartiments del *stack* de ED es vagin concentrant, mentre que altres es van diluint. Per tant, existeix un gradient de concentració entre ambdós costats de la membrana. Quan la concentració de ions en els compartiments de concentrat és substancialment més alta que la dels compartiments de diluït, es genera un flux de partícules que tendeix a homogeneïtzar les dissolucions i igualar la seva concentració, així doncs, s'inicia el procés de difusió [5].

A més dels processos de migració (migració iònica) i difusió (difusió iònica i osmosi), existeix un tercer mecanisme que consisteix en el flux per convecció. Aquest mecanisme contempla el transport mecànic degut a l'agitació i vibració o a gradients de temperatura, densitat i pressió. En el cas de l'electrodiàlisi, el flux per convecció acostuma a ser menyspreat davant als fenòmens de migració i difusió [5].

En la figura 11 es mostra aquests fenòmens en un *stack* de ED alimentat amb una dissolució de NaCl on es poden observar els processos mencionats anteriorment.

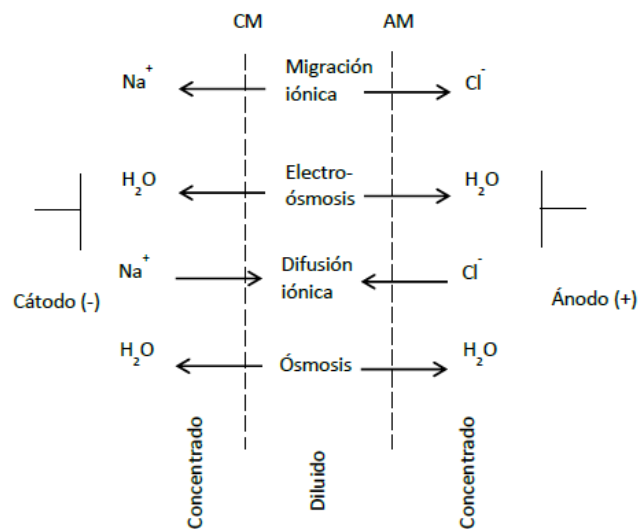


Figura 11. Esquema del mecanisme de transport en una cel·la d'electrodiàlisi. Font:[13]

Els mecanismes de transferència de massa citats poden ser representats per equacions matemàtiques senzilles i àmpliament utilitzades: la *Llei de Faraday* i la *Llei de Fick*. A continuació es descriuen els fenòmens de migració iònica, de difusió iònica i de osmosi.

4.3.1. Llei de Faraday

La llei de Faraday aplicada a l'electrodiàlisi permet calcular la migració de sal per una determinada intensitat de corrent aplicada mitjançant l'equació següent: [5].

$$M = M_{Na^+} + M_{Cl^-} = \frac{\eta \cdot I}{z \cdot F} \cdot 3600 \quad (\text{Eq.1})$$

On:

$$M = \text{Migració iònica, mol} \frac{NaCl}{h}$$

$$M_{Na^+} = \text{Migració de ions } Na^+, \text{mol} \frac{Na^+}{h}$$

$$M_{Cl^-} = \text{Migració de ions } Cl^-, \text{mol} \frac{Cl^-}{h}$$

η = Rendiment elèctric, adimensional

I = Intensitat de corrent, A

z = Càrrega iònica NaCl, adimensional

$$F = \text{Constant de Faraday, } \frac{C}{\text{mol } e^-}$$

4.3.2. Llei de Fick

Segons la Llei de Fick, el flux de solució que flueix com a conseqüència d'un gradient de concentració pot aproximar-se pel primer terme de la sèrie de Taylor, resultant proporcional al gradient $\frac{\partial C}{\partial x}$ amb constant de proporcionalitat igual al coeficient del mitjà per on difonen les partícules [5].

Considerant que el flux és unidimensional a través de les membranes; que els coeficients de difusió tant dels ions sodi com els ions clorurs són constants; i que el gradient de concentració és uniforme al

llarg de tota la superfície de les membranes, aquesta llei estableix que la difusió iònica es pot calcular mitjançant l'equació següent [5]:

$$D = D_{Cl^-} + D_{Na^+} = \frac{D_{Cl_{mia}^-} \cdot S}{\sigma_{mia}} \cdot (C_{c_{mia}} - C_{d_{mia}}) \cdot 3600 + \frac{D_{Na_{mic}^+} \cdot S}{\sigma_{mic}} \cdot (C_{c_{mic}} - C_{d_{mic}}) \cdot 3600 \quad (\text{Eq. 2})$$

On:

$$D = \text{Difusió iònica, mol} \frac{NaCl}{h}$$

$$D_{Cl^-} = \text{Difusió dels ions } Cl^-, \text{mol} \frac{Cl^-}{h}$$

$$D_{Na^+} = \text{Difusió dels ions } Na^+, \text{mol} \frac{Na^+}{h}$$

$$D_{Cl_{mia}^-} = \text{Coeficient de difusió de } Cl^- \text{ a través de la membrana de bescanvi aniònic, } \frac{dm^2}{s}$$

$$D_{Na_{mic}^+} = \text{Coeficient de difusió de } Na^+ \text{ a través de la membrana de bescanvi catiònic, } \frac{dm^2}{s}$$

$$S = \text{Secció efectiva de les membranes, } dm^2$$

$$\sigma_{mia} = \text{Espesor de la membrana de bescanvi aniònic, } dm$$

$$\sigma_{mic} = \text{Espesor de la membrana de bescanvi catiònic, } dm$$

$$C_{c_{mia}} = \text{Concentració en la superfície de les membranes de bescanvi aniònic en el costat del compartiment de concentrat, mol} \frac{NaCl}{h}$$

$$C_{d_{mia}} = \text{Concentració en la superfície de les membranes de bescanvi aniònic en el costat del compartiment de diluït, mol} \frac{NaCl}{h}$$

$$C_{c_{mic}} = \text{Concentració en la superfície de les membranes de bescanvi catiònic en el costat del compartiment de concentrat, mol} \frac{NaCl}{h}$$

$$C_{d_{mic}}$$

$$= \text{Concentració en la superfície de les membranes de bescanvi catiònic en el costat del compartiment de diluït, mol} \frac{NaCl}{h}$$

De la mateixa manera, per l'aigua que flueix [5]:

$$D_w = \frac{D_{w_mia} \cdot S}{\sigma_{mia}} \cdot (C_{c_mia} - C_{d_mia}) \cdot 3600 + \frac{D_{w_mia} \cdot S}{\sigma_{mic}} \cdot (C_{c_mic} - C_{d_mic}) \cdot 3600 \quad (\text{Eq.3})$$

On:

D_w = Difusió d'aigua per òsmosis, $\text{mol} \frac{H_2O}{h}$

D_{w_mia} = Coeficient de difusió de l'aigua a través de les membranes de bescanvi aniònic, $\frac{dm^2}{s}$

D_{w_mic} = Coeficient de difusió de l'aigua a través de les membranes de bescanvi catiònic, $\frac{dm^2}{s}$

5. Modelització dels diferents tipus de dessalinització mitjançant l'electrodiàlisi

5.1. Introducció

En el desenvolupament històric del mètode de l'electrodiàlisi s'han anat aportant diverses teories i estudis, principalment, l'equació de Nernst-Planck descrivint el transport de masses i desenvolupada per Planck l'any 1890. Donnan a l'any 1924 presentà la teoria de l'equilibri de membrana, un any després, Michaelis i Fujita estudiaren la permselectivitat de membranes biològiques mitjançant membranes col·loïdals. Teorell (1935) juntament amb Mayer i Sievers (1936) discutiren fenòmens de membrana i revelaren el mecanisme del potencial de membrana, conductivitat elèctrica, número de transport, etc. Mayer i Straus a l'any 1940 electrodiàlizaren una solució de KCl i s'adonaren del doblement en la concentració de KCl. Wyllie i Patnode juntament amb Juda i McRae (1950) van inventar un intercanvi iònic artificial i les membranes s'aplicaren per dessalinitzar aigua marina. [4]

En aquest capítol es presenten els models matemàtics, les condicions d'operació i funcionament del sistema emprats per tal de simular els diferents sistemes de dessalinització mitjançant electrolisi utilitzant *Microsoft Excel*.

5.2. Modelització del cas *Single-Pass (Continuous)*

5.2.1. Estructura y funcionament

El sistema *single-pass (continuous)* representat a la figura 12 consta d'una cel·la de membranes formada per cel·les dessaladores i de concentracions marcades de color gris. El número de cel·les és N per a les cel·les dessaladores i $N+1$ per a les de concentració. L'ànode i el càtode es col·loquen als extrems del *stack* i el corrent elèctric és subministrat entre els elèctrodes. La solució d'alimentació C'_{in} s'introdueix a les cel·les dessaladores a una velocitat u'_{in} . C'_{in} i u'_{in} es redueixen a la concentració de sal promig C'_{out} (C''_{out}) i a la velocitat de sortida u'_{out} a les sortides de les cel·les dessaladores. Una part de la solució d'alimentació s'introdueix també a les cel·les de concentració per prevenir la formació d'incrustacions en aquestes cel·les. La concentració de sal i la velocitat en les cel·les de concentració és $C''_{in}=C'_{in}$ i u''_{in} a l'entrada, C''_{out} i u''_{out} a les sortides. Al subministrar una corrent elèctrica (I), es transfereixen ions de dissolució des de les cel·les dessaladores fins a les de concentrat a través de un parell de membranes de intercanvi iònic, on el respectiu flux de sal i aigua està definit per J_S i J_V , respectivament [9].

Les cel·les de partició estan incorporades entre el *stack* i les cel·les de elèctrodes per evitar la influència les reaccions d'elèctrodes al rendiment de l'electrodiàlisi. Una part del concentrat que surt de les cel·les de concentració és subministra a les cel·les d'elèctrodes i cel·les de partició, així doncs es forma un procés de ED de múltiples etapes organitzades en un sol pas [9].

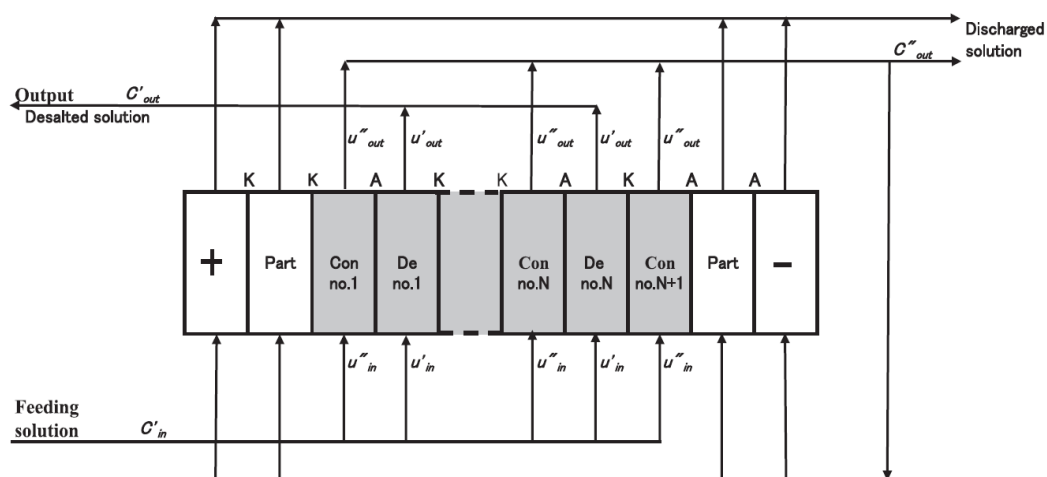


Figura 12. Esquema del sistema single-pass. K: Membrana de bescanvi catiònic; A: Membrana de bescanvi aniònic; +: Ànode; -: Càtode; De: Cel·la dessaladora; Con: Cel·la de concentració; Part: Cel·la de partició. [9]

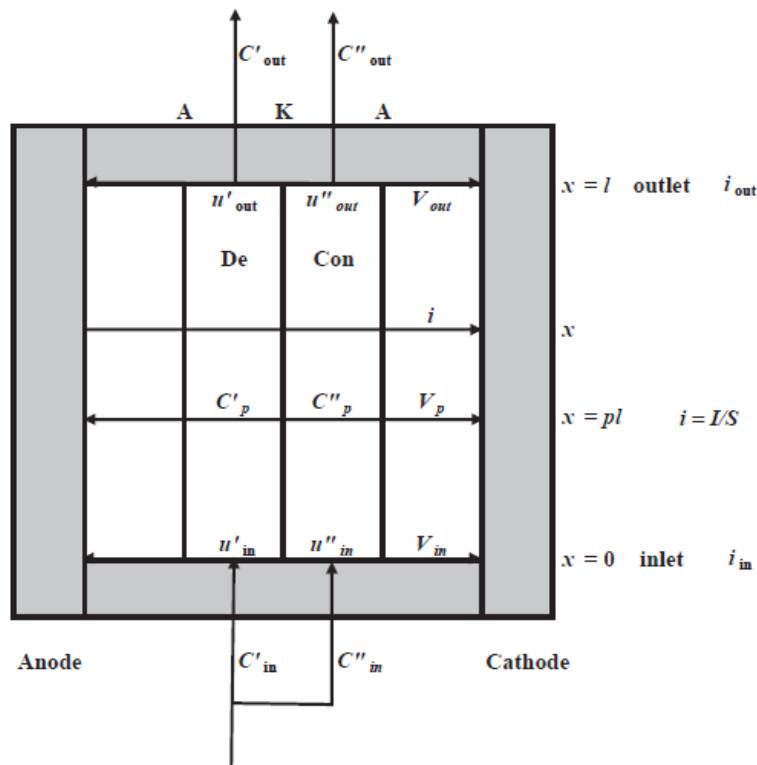


Figura 13. Transport massic del sistema single-pass. De: Cel·la dessaladora; Con: Cel·la de concentració; K: membrana de bescanvi catiònic; A; membrana de bescanvi aniónic. Font: [9]

El canvi en la concentració de sal en les cel·les dessaladores provoca un canvi de densitat de corrent al llarg del pas del flux des de les entrades (i_{in}) fins a les sortides a (i_{out}) [9].

La densitat de corrent (I/S); el flux de sal (J_s); el flux d'aigua (J_v); la concentració en les cel·les dessaladores (C'_p); la concentració en les cel·les de concentració (C''_p) i velocitat de dissolució (u'_p) són calculats a un punt entremig de les cel·les, representat en la figura 13 com $x=pl$. V_{in} , V_{out} i V_p són les diferències de voltatge entre els elèctrodes a les entrades ($x=0$), a les sortides ($x=l$) i a $x=pl$ de les cel·les dessaladores respectivament ($V_{in}=V_{out}=V_p$) [9].

5.2.2. Especificacions i condicions d'operació

A continuació es recullen les especificacions i condicions d'operació necessàries per tal de realitzar la simulació [9].

1. Gruix de les cel·les dessaladores i de concentració; a (cm)
2. Amplada de les cel·les dessaladores i de concentració; b (cm)
3. Llargada de les cel·les dessaladores i de concentració; l (cm)
4. Àrea de la membrana; $S=b \cdot l$ (cm²)
5. Número de *stacks* en una cel·la de membranes; 1

6. Número de cel·les dessaladores, de concentració i parells de membrana integrats en un *stack*; $N, N+1, N$
7. Els elèctrodes de sonda s'insereixen en les cel·les de concentració integrades als extrems del *stack* per mesurar la tensió de la pila.
8. Densitat de corrent mitjana; I/S (A/cm²)
9. Concentració de sal a l'entrada de les cel·les dessaladores; C'_{in} (eq/cm³)
10. Concentració de sal a l'entrada de les cel·les de concentració; $C''_{in}=C'_{in}$ (eq/cm³)
11. Velocitat a l'entrada de les cel·les dessaladores i de concentració; $u'_{in}=u''_{in}$ (cm/s)
12. Desviació estàndard de la distribució normal de la relació de la velocitat de la solució; σ
13. Sistema de flux en les cel·les dessaladores i concentració; Flux d'un sol pas.
14. Dimensions dels separadors:
 - a. Diàmetre d'una barra espaiadora; d_s = mig gruix de la cel·la; $a/2$
 - b. Distància entre varetes; x
 - c. Angle de encreuament de les varetes: θ
15. Número i dimensions de les cel·les i ranures:

Taula 1. Número i dimensions de les cel·les i ranures en un parell de cel·les. [9]

Cel·la/ranura	Nombre	Gruix	Amplada	Llargada
Cel·la dessaladora	1	a	b	l
Cel·la de concentrat	1	a	b	l
Ranura dessaladora	n'	a	w'	h'
Ranura de concentrat	n''	a	w''	h''

5.2.3. Equacions de transport de matèria

El flux de ions (J_s) i d'aigua (J_v) a través de la membrana s'obté mitjançant les concentracions de les cel·les dessaladores i de concentració. Per això s'utilitzen números de transport de tipus fenomenològic [9].

$$J_s = \lambda(I/S) - \mu(C_p'' - C_p') = (t_K + t_A - 1) \cdot (I/S)/F - \mu(C_p'' - C_p') = \eta(I/S)/F \quad (\text{Eq. 4})$$

$$J_v = \phi(I/S) + \rho(C_p'' - C_p') \quad (\text{Eq. 5})$$

On λ (eq/C) és el número total de transport, μ (cm/s) és la permeabilitat del solut global, ϕ (cm³/C) és la permeabilitat electro-osmòtica global, ρ (cm⁴/eq·s) és la permeabilitat del volum osmòtic total, η (adimensional) és l'eficiència, i per últim, F (As/mol) és la constant de Faraday

Els números de transport existents en les equacions és tracten de correlacions empíriques en funció de la temperatura [9]:

$$\rho [cm^4 \cdot mol^{-1} \cdot s] = 3,421 \cdot 10^{-3} + 3,333 \cdot 10^{-4}T \quad (\text{Eq. 6})$$

$$\lambda [mol \cdot C^{-1}] = 4,208 \cdot 10^{-6} + 1,914 \cdot 10^{-5}\rho \quad (\text{Eq. 7})$$

$$\phi [cm^3 \cdot A^{-1} \cdot s^{-1}] = 3,768 \cdot 10^{-3} \cdot \rho^{0,2} - 1,019 \cdot 10^{-2} \cdot \rho \quad (\text{Eq. 8})$$

$$\mu [cm \cdot s^{-1}] = 2,005 \cdot 10^{-4} \cdot \rho \quad (\text{Eq. 9})$$

A partir de ρ es permet calcular la resistència elèctrica de corrent altern d'un parell de membranes (r_{alter})[9].

$$r_{alter} [\Omega \cdot cm^2] = r_{alter,K} + r_{alter,A} = 1,2323 \cdot \rho^{-(1/3)} \quad (\text{Eq. 10})$$

Normalment, les membranes de bescanvi iònic funcionen sota un corrent elèctric directe. La resistència elèctrica de corrent directe de la membrana $r_{dire}=r_{memb}$ està influenciada per la concentració de sal de les solucions col·locades a banda i banda de la membrana, i s'expressa amb l'equació següent

$$r_{dire} = \left(\frac{r_{dire}^*}{r_{alter}} \right) \times \left(\frac{r_{dire}}{r_{dire}^*} \right) \times r_{alter} = r_{memb} \quad (\text{Eq. 11})$$

Per mesurar la resistència elèctrica de corrent continu d'una membrana de bescanvi, la membrana es col·loca en un sistema de dos cel·les amb la presència d'una dissolució de concentració baixa de NaCl (conductivitat específica, κ' (S/cm)) que s'introdueix en ambdós cel·les. La resistència elèctrica de la membrana en corrent continu r_{dire}^* ($\Omega \cdot cm^2$). La relació entre k' i r_{dire}^*/r_{alter} s'expressa per la l'equació empírica següent: [5]

$$\log\left(\frac{r_{dire}^*}{r_{alter}}\right) = 0,3380 + 0,6386 \cdot \log k' + 0,2961 \cdot (\log k')^2 \quad (\text{Eq. 12})$$

Es subministra una dissolució de NaCl de baixa concentració (conductivitat específica, k') a la part dessaladora del *stack*. Una altra dissolució amb alta concentració de NaCl (conductivitat específica, k'') es subministra a la part de concentració del sistema. La resistència elèctrica de corrent continu de la membrana r_{dire} es mesura a una temperatura de 25 °C amb el pas d'un corrent elèctric continu restant l'efecte del potencial de la membrana. La relació empírica entre k''/k' i r_{dire}/r_{dire}^* és [9]:

$$\left(\frac{r_{dire}}{r_{dire}^*}\right) = 1,000 - 0,1359 \cdot \log\left(\frac{k''}{k'}\right) \quad (\text{Eq. 13})$$

5.2.4. Concentració de sal i velocitat en les cel·les dessaladores

Les dissolucions de sal es subministren a les cel·les dessaladores i passen a través d'aquestes una sola vegada (*single-pass flow*). Aquest fenomen s'expressa amb les següents equacions [9]:

$$q'_{in} (cm^3/s) = ab \times u'_{in} (cm/s) \quad (\text{Eq. 14})$$

$$q'_{out} (cm^3/s) = q'_{in} - q \quad (\text{Eq. 15})$$

$$q (cm^3/s) = blJ_V \quad (\text{Eq. 16})$$

$$u'_{out} (cm/s) = q'_{out} / ab \quad (\text{Eq. 17})$$

On q'_{in} és el volum de la dissolució a l'entrada de les cel·les dessaladores i q'_{out} és el volum de la dissolució a la sortida d'aquestes.

Suposant que les velocitats lineals varien linealment en les cel·les dessaladores, la velocitat lineal mitjana al punt $x=pl(u'_p)$ (figura 13) és [9]:

$$u'_p = u'_{in} - p(u'_{in} - u'_{out}) = u'_{in} - p(q/ab) \quad (\text{Eq. 18})$$

La concentració a la sortida de les cel·les dessaladores, C'_{out} és calcula mitjançant l'equació següent [9]:

$$C'_{out}(eq/cm^3) = C'_{in} - \left(\frac{\eta l}{aF}\right) \cdot \left(\frac{1}{u'_p}\right) \cdot \left(\frac{I}{S}\right) \quad (\text{Eq. 19})$$

Les velocitats lineals en les cel·les dessaladores no són uniformes entre les diferents cel·les. La limitació de la densitat de corrent $(I/S)_{lim}$ està fortament influenciada per la distribució de la velocitat de la dissolució entre les cel·les dessaladores. La relació de la velocitat (ξ) en aquestes cel·les es defineix per [9]:

$$\xi = \frac{u - \bar{u}}{\bar{u}} \quad (\text{Eq. 20})$$

On u és la velocitat lineal en cada una de les cel·les dessaladores i \bar{u} és la velocitat mitjana d'aquestes que estan integrades en un *stack*. Es suposa que les freqüències Y_j de ξ en tot j (ξ_j) s'expressa mitjançant la distribució normal amb una desviació estàndard σ [9].

$$Y_j = \frac{N}{\sqrt{2\pi}} \cdot \int_{\xi_j - \Delta\xi_j}^{\xi_j + \Delta\xi_j} \left(-\frac{\xi^2}{2}\right) d\xi \quad (\text{Eq. 21})$$

On N és el nombre de cel·les dessaladores, ξ_j és la relació de la velocitat de la dissolució en un conjunt de cel·les dessaladores j . $\Delta\xi_j$ és $\frac{1}{2}$ el valor de ξ_j . ξ_j es divideix en $n+1$; $\xi_0, \xi_1, \xi_2 \dots \xi_n$, de la següent manera [9]:

$$\xi_j = -3\sigma \left(1 - \frac{j}{n/2}\right), j = 0, 1, 2 \dots n \quad (\text{Eq. 22})$$

A partir de les equacions anteriors, la velocitat lineal al punt $x=pl$ (figura 13) és [9]:

$$u'_{p,j} = u'_p(\xi_j + 1) \quad (\text{Eq. 23})$$

Aleshores [9];

$$C'_{out,j} = C'_{in,j} - \left(\frac{\eta l}{aF}\right) \times \frac{1}{u'_p(\xi_j + 1)} \left(\frac{I}{S}\right) \quad (\text{Eq. 24})$$

On, $C'_{in,j}=C'_{in}$

Resumint, la concentració de sal a $x=pl$ (C'_p), es calcula mitjançant la següent equació [9]:

$$C'_p = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^n Y_j C'_{p,j} \quad (\text{Eq. 25})$$

On;

$$C'_{p,j} = C'_{in,j} - \left(\frac{\eta l}{aF}\right) \times \frac{1}{u'_{p/2}(\xi_j + 1)} \{a_1 p + (a_2/2)p^2 + (a_3/3)p^3\} \quad (\text{Eq. 26})$$

5.2.5. Concentració de sal i velocitat en les cel·les de concentrat

Per prevenir la formació d'incrustacions, les solucions salines subministrades a les cel·les dessaladores també s'alimenten a les entrades de les cel·les de concentració a una velocitat lineal mitjana de u''_{in} . Les dissolucions passen a través de les cel·les de concentració una sola vegada (*single-pass flow*). Les velocitats lineals tampoc són uniformes entre les cel·les de concentració com passa també en les cel·les de dessaladores. Tot i això, la distribució de la velocitat de la dissolució en les cel·les de concentració mai influeix en la densitat de corrent límit, per la que s'assumeix que la velocitat uniforme entre les

cel·les de concentració. El balanç de matèria de les dissolucions i ions que es transfereixen en les cel·les de concentració ve donat per les següents equacions [9]:

Dissolució:

$$abN(u''_{out} - u'_{in}) = SNJ_V = lbN \left\{ \phi \left(\frac{I}{S} \right) + \rho(C''_p - C'_p) \right\} \quad (\text{Eq. 27})$$

Ions:

$$abN(C''_{out}u''_{out} - C''_{in}u'_{in}) = SNJ_S = lbN \left\{ \lambda \left(\frac{I}{S} \right) + \mu(C''_p - C'_p) \right\} \quad (\text{Eq. 28})$$

Suposant que la concentració de sal i la velocitat de la dissolució en les cel·les de concentració, varien, C''_{out} , C_p , u''_{out} i u''_p es calculen mitjançant:

$$C''_{out} = \frac{\sqrt{M^2 + 4LN} - M}{2L} \quad (\text{Eq. 29})$$

$$C''_p = C'_{in} + p(C''_{out} - C'_{in}) \quad (\text{Eq. 30})$$

$$u''_{out} = \frac{1}{2}(\sqrt{M^2 + 4LN} + M) \quad (\text{Eq. 51})$$

$$u''_p = u'_{in} + p(u''_{out} - u'_{in}) \quad (\text{Eq. 52})$$

On:

$$L = \frac{l}{a} \rho p \quad (\text{Eq. 53})$$

$$M = \frac{l}{a} \left[\phi \left(\frac{I}{S} \right) - \rho \{ C_p' - (1 - p) C_{in}'' \} \right] + u_{in}'' \quad (\text{Eq. 54})$$

$$N = C_{in}' u_{in}'' + \frac{l}{a} \left\{ \lambda \left(\frac{I}{S} \right) - \mu (C_p'' - C_p') \right\} \quad (\text{Eq. 55})$$

La concentració salina d'una dissolució que passa a través del parell de membranes en $x=p$; C_p'' (utilitzada a les equacions 4 i 5), es calcula de la següent manera [9]:

$$C_p'' = \frac{1}{2\rho} (\sqrt{A^2 - 4\rho B} - A) \quad (\text{Eq. 56})$$

$$A = \phi(I/S) + \mu - \rho C_p' \quad (\text{Eq. 57})$$

$$B = \lambda(I/S) + \mu C_p' \quad (\text{Eq. 58})$$

5.2.6. Propietats físiques de la dissolució en les cel·les dessaladores i en les cel·les de concentració

És necessari convertir les unitats de la concentració de sal C (eq/cm^3) descrita en l'apartat en C_1 (eq/dm^3), C_2 (grams de sal/ dm^3 de dissolució) i finalment, C_3 (grams de sal/ kg de dissolució). Per realitzar aquests canvis d'unitats s'utilitzen les equacions següents:

$$C_1 (\text{eq}/\text{dm}^3) = C (\text{eq}/\text{cm}^3) \cdot 10^3 \quad (\text{Eq. 59})$$

$$C_2 (\text{g}/\text{dm}^3) = 57,87 \cdot C_1 \quad (\text{Eq. 40})$$

$$C_3 \text{ (g/kg)} = \frac{\sqrt{Q^2 + 4PC_2} - Q}{2P} \quad (\text{Eq. 41})$$

$$P = (7,881 - 1,368 \cdot 10^{-2}T + 8,978 \cdot 10^{-5}T^2) \cdot 10^{-4} \quad (\text{Eq. 42})$$

La densitat d (kg/dm³) [5], la conductivitat elèctrica específica κ (S/cm) [5], el coeficient d'activitat de NaCl (γ) [5] ve donat per les següents equacions en funció de la temperatura T (°C) i la concentració de sal C_3 (g de sal/kg de dissolució):

$$d = 1,001 - 1,101 \cdot 10^{-4}T - 3,356 \cdot 10^{-6}T^2 + (7,881 - 1,368 \cdot 10^{-2}T + 8,978 \cdot 10^{-5}T^2) \cdot 10^{-4}C_3 \quad (\text{Eq. 43})$$

$$\kappa = (0,9383 + 3,463 \cdot 10^{-2}T) \cdot 10^{-3}C_3 - (1,655 + 3,863 \cdot 10^{-2}T) \cdot 10^{-6}C_3^2 - (1,344 + 3,160 \cdot 10^{-2}T) \cdot 10^{-9}C_3^3 \quad (\text{Eq. 44})$$

$$\gamma = 0,5927 + 0,4355C_3^{-0,5} - 7,201 \cdot 10^{-5}C_3 + 3,503 \cdot 10^{-6}C_3^2 \quad (\text{Eq. 45})$$

5.2.7. Resistència elèctrica d'un parell de membranes bescanvi iònic i dissolucions en cel·les dessaladores i de concentració:

La resistència elèctrica d'una cel·la dessaladora r' i d'una cel·la de concentració r'' es calculen d'acord a [9]:

$$r' = \frac{a}{(1 - \varepsilon)k'} \quad (\text{Eq. 46})$$

$$r'' = \frac{a}{(1 - \varepsilon)k''} \quad (\text{Eq. 47})$$

On ε defineix un efecte de filtració de corrent elèctric d'un espaiador de xarxa diagonal i ve determinat per la relació de volum de les varetes espaiadores en una cel·la dessaladora i de concentració de la següent manera [9]:

$$\varepsilon = \frac{\pi a}{8\chi \sin\theta} \quad (\text{Eq. 48})$$

On χ es la distància entre les barres espaiadores, θ és l'angle de tall que formen les barres espaiadores.

5.2.8. Caiguda de pressió en les cel·les dessaladores, concentració i ranures

El diàmetre hidrodinàmic d'una cel·la dessaladora o de concentració; $d_{H,cell}$ i la de la ranura de dessalinització o concentració; $d_{H,slot}$, s'expressen amb les següents equacions [5]:

$$d_{H,cell} = \frac{8 - \pi \frac{a}{\chi}}{4 \left(\frac{1}{b} + \frac{1}{a} \right) + 2\pi \left(1 - \frac{a}{4b} \right) \cdot \frac{1}{\chi}} \quad (\text{Eq. 49})$$

$$d_{H,slot} = \frac{8 - \pi \frac{a}{\chi}}{4 \left(\frac{1}{w} + \frac{1}{a} \right) + 2\pi \left(1 - \frac{a}{4w} \right) \cdot \frac{1}{\chi}} \quad (\text{Eq. 50})$$

On w és l'amplada d'un pas de flux de ranura, com s'observa en la figura 14.

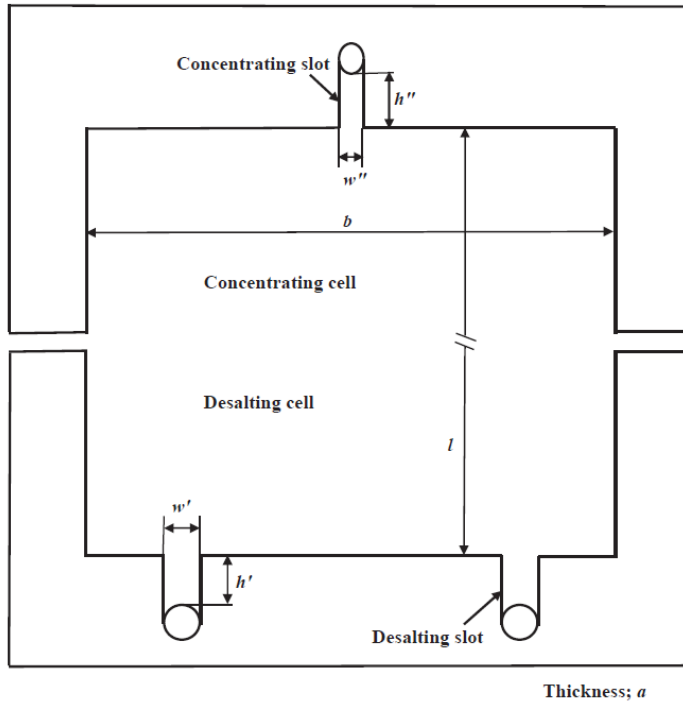


Figura 14. Estructura d'una cel·la dessaladora i de concentració. [9]

La diferencia de pressió entre les entrades i sortides d'una cel·la dessaladora o de concentració (ΔP_{cell}); la diferencia de pressió en les ranures dessaladores i de concentració ΔP_{slot} [9] es calculen d'acord amb:

$$\Delta P_{cell}(Pa) = \frac{3,2\mu l u_{cell}}{(d_{H,cell})^2} \quad (\text{Eq.51})$$

$$\Delta P_{slot}(Pa) = \frac{3,2\mu h u_{slot}}{(d_{H,slot})^2} \quad (\text{Eq.52})$$

On h és el llargada d'un pas de flux de ranura (figura 14), u_{cell} és la velocitat lineal en les cel·les dessaladores o de concentració, u_{slot} és la velocitat lineal en les ranures, μ (g/cm·s) es el coeficient de viscositat de la dissolució i s'expressa en funció de la temperatura T (°C) i la concentració de l'electròlit C (g de sal/kg de dissolució) de la dissolució [5]:

$$\begin{aligned} \mu = & 1,200 \cdot 10^{-2} - 1,224 \cdot 10^{-4}T + (2,107 \cdot 10^{-5} - 1,529 \cdot 10^{-7}T)C \\ & + (-1,392 \cdot 10^{-8} + 1,123 \cdot 10^{-10}T)C^2 \\ & + (5,819 \cdot 10^{-10} - 6,769 \cdot 10^{-12}T)C^3 \end{aligned} \quad (\text{Eq. 55})$$

u_{cell} i u_{slot} són les velocitats lineals en les cel·les i ranures. Per canviar les unitats de les diferències de pressió mencionades anteriorment $\Delta P_{slot}(Pa)$ i $\Delta P_{cell}(Pa)$ es calcula utilitzant la següent conversió [9]:

$$\Delta P(m) = 1,01972 \cdot 10^{-4} \Delta P(Pa) \quad (\text{Eq. 54})$$

5.2.9. Distribució de la densitat de corrent

5.2.9.1. Equació quadràtica de distribució de la densitat de corrent:

En un sistema d'electrodiàlisis, la densitat de corrent es redueix degut a la disminució de la concentració de sal en les cel·les dessaladores al llarg d'un sol pas de flux. Aquest fenomen exerceix una influència en la limitació de la densitat de corrent $(I/S)_{lim}$. La distribució de la densitat de corrent s'assumeix que s'aproxima a la següent equació quadràtica expressada respecte la distància x/l des de les entrades de les cel·les dessaladores [9].

$$i = a_1 + a_2 \left(\frac{x}{l}\right) + a_3 \left(\frac{x}{l}\right)^2 \quad (\text{Eq. 55})$$

Per determinar a_1 , a_2 i a_3 s'estableixen tres equacions simultànies que es descriuen en les seccions següents [9].

5.2.9.2. Primera equació simultània ($V_{in}=V_{out}$) per calcular ζ_{inout}

Quan una cel·la de membranes està integrada per un alt nombre de parells de membrana, la pèrdua òhmica dels elèctrodes és insignificant en comparació amb el valor entre els elèctrodes. Aquest fenomen està expressat per l'equació 56, el que significa que la diferència de voltatge entre els elèctrodes en l'entrada de les cel·les dessaladores V_{in} és igual al valor en les sortides V_{out} .

$$V_{in} = V_{out} \quad (\text{Eq. 56})$$

$$V_{in} = A_1 i_{in} + A_2 \quad (\text{Eq. 57})$$

$$V_{out} = B_1 i_{out} + B_2 \quad (\text{Eq. 58})$$

A_1 , A_2 , B_1 i B_2 es calculen per N parells de membrana i pels paràmetres determinats en la relació de la velocitat de la dissolució ξ en $j=0,1,2\dots n$.

La resistència elèctrica a $x=0$ (entrades) [9]:

$$A_1 = (r'_{in} + r''_{in} + r_{memb,in})N \quad (\text{Eq. 59})$$

El potencial de la membrana a $x=0$ (entrades) [9]:

$$A_2 = 2(t_K + t_A - 1) \left(\frac{RT}{F} \right) N \cdot \ln \left(\frac{\gamma''_{in} C'_{in}}{\gamma'_{in} C''_{in}} \right) \quad (\text{Eq. 60})$$

La resistència elèctrica a $x=l$ (sortides) [9]:

$$B_1 = \sum_{j=0}^n Y_j r'_{out,j} + r'' N + \sum_{j=0}^n Y_j r_{memb,out,j} \quad (\text{Eq. 61})$$

El potencial de la membrana a $x=l$ (sortides) [9]:

$$B_2 = 2(t_K + t_A - 1) \left(\frac{RT}{F} \right) \sum_{j=0}^n Y_j \left(\frac{\gamma''_{in} C'_{in}}{\gamma'_{in} C''_{in}} \right) \quad (\text{Eq. 62})$$

$$Z_1 = \frac{B_1}{A_1} \quad (\text{Eq. 63})$$

$$Z_2 = -\frac{A_2 - B_2}{A_1} \quad (\text{Eq. 64})$$

$$\alpha_1 = \left(\frac{I}{S}\right) - Z_2 \quad (\text{Eq. 65})$$

$$\alpha_2 = -2 \left\{ 3 \left(\frac{I}{S}\right) - 2Z_2 \right\} \quad (\text{Eq. 66})$$

$$\alpha_3 = 3 \left\{ 2 \left(\frac{I}{S}\right) - Z_2 \right\} \quad (\text{Eq. 67})$$

$$\beta_1 = Z_1 \left(\frac{I}{S}\right) \quad (\text{Eq. 68})$$

On p es:

$$\beta_2 = -2(2Z_1 + 1) \left(\frac{I}{S}\right) \quad (\text{Eq. 69})$$

$$\beta_3 = 3(Z_1 + 1) \left(\frac{I}{S}\right) \quad (\text{Eq. 70})$$

$$\zeta_{inout} = \frac{\alpha_1 + \alpha_2 p + \alpha_3 p^2}{\beta_1 + \beta_2 p + \beta_3 p^2} \quad (\text{Eq. 71})$$

Es predetermina en l'equació 71 per calcular ξ_{inout} temporal.

5.2.9.3. Segona equació simultània ($V_{in}=V_p$) per calcular ζ_{inp}

L'equació 72 prové de l'equació 56 [9]:

$$V_{in} = V_p \quad (\text{Eq. 72})$$

$$V_{in} = A_1 i_{in} + A_2 \quad (\text{Eq. 73})$$

$$V_p = C_1 \left(\frac{I}{S} \right) + C_2 \quad (\text{Eq. 74})$$

$$A_1 = (r'_{in} + r''_{in} + r_{memb,in})N \quad (\text{Eq. 75})$$

$$A_2 = 2(t_K + t_A - 1) \left(\frac{RT}{F} \right) N \cdot \ln \left(\frac{\gamma''_{in} C'_{in}}{\gamma'_{in} C''_{in}} \right) \quad (\text{Eq. 76})$$

La resistència elèctrica a $x=pl$ [9]:

$$C_1 = \sum_{j=0}^n Y_j r'_{p,j} + r''N + \sum_{j=0}^n Y_j r_{memb,p,j} \quad (\text{Eq. 77})$$

El potencial de membrana a $x=pl$ [9]:

$$C_2 = 2(t_K + t_A - 1) \left(\frac{RT}{F} \right) \sum_{j=0}^n Y_j \left(\frac{\gamma''_p C''_p}{\gamma'_p C'_p} \right) \quad (\text{Eq. 78})$$

$$Z_3 = \frac{C_1}{A_1} \quad (\text{Eq. 80})$$

$$Z_4 = -\frac{A_2 - C_2}{A_1} \quad (\text{Eq. 81})$$

$$\gamma_1 = (Z_3 - 1) \left(\frac{I}{S} \right) - Z_4 \quad (\text{Eq. 82})$$

$$\gamma_2 = 2 \left\{ (3 - 2Z_3) \left(\frac{I}{S} \right) - 2Z_4 \right\} \quad (\text{Eq. 83})$$

$$\gamma_3 = 3 \left\{ (Z_3 - 2) \left(\frac{I}{S} \right) - Z_4 \right\} \quad (\text{Eq. 84})$$

$$\zeta_{inp} = \frac{\gamma_1 + \gamma_2 p + \gamma_3 p^2}{\{ (2p - 3p^2) \left(\frac{I}{S} \right) \}} \quad (\text{Eq. 85})$$

On ζ_{inp} es calcula substituint la p determinada que ha estat calculada en l'equació 71. [9]

5.2.9.4. Tercer equació simultània $\zeta_{inout} = \zeta_{inp}$ per calcular p

La p es calcula mitjançant un càlcul de proba i error fins a complir la següent igualtat:

$$\zeta_{inout} = \zeta_{inp} \quad (\text{Eq. 86})$$

5.2.10. Coeficients en les equacions de distribució de la densitat i el coeficient de uniformitat.

Els coeficients de la equació quadràtica de la distribució de la densitat de corrent presents en l'equació 71 es calculen de la següent manera [9]:

$$a_1 = Z_1 \zeta_{out} \left(\frac{I}{S} \right) + Z_2 \quad (\text{Eq.87})$$

$$a_2 = 2[\{3 - (2Z_1 + 1)\zeta_{out}\} \left(\frac{I}{S} \right) - 2Z_2] \quad (\text{Eq.88})$$

$$a_3 = -3[\{2 - (Z_1 + 1)\zeta_{out}\} \left(\frac{I}{S} \right) - Z_2] \quad (\text{Eq. 89})$$

ζ_{in} i ζ_{out} són la uniformitat de la densitat de corrent de entrada i sortida respectivament, venen donades per [9]:

$$\zeta_{in} = \frac{i_{in}}{I/S} = \frac{a_1}{I/S} \quad (\text{Eq. 90})$$

$$\zeta_{out} = \frac{i_{out}}{I/S} = \frac{a_1 + a_2 + a_3}{I/S} \quad (\text{Eq. 91})$$

5.2.11. Voltatge de la cel·la, consum d'energia, recuperació d'aigua i raó de dessalinització

A partir de les equacions 90 i 91, la densitat de corrent a l'entrada (i_{in}) i a la sortida (i_{out}) de la cel·la dessaladora es pot calcular segons [9]:

$$i_{in} = (I/S)\zeta_{in} \quad (\text{Eq. 92})$$

$$i_{out} = (I/S)\zeta_{out} \quad (\text{Eq. 93})$$

El voltatge òhmic i el voltatge de la membrana a l'entrada de la cel·la dessaladora ($V_{\Omega_{in}}$ i $V_{memb_{in}}$) i els mateixos voltatges a la sortida ($V_{\Omega_{out}}$ i $V_{memb_{out}}$) són [9]:

$$V_{\Omega_{in}} = (r'_{in} + r_{memb,in} + r'')i_{in} \quad (\text{Eq. 94})$$

$$V_{memb_{in}} = 2(t_K + t_A - 1) \times \left(\frac{RT}{F}\right) \ln \left(\frac{\gamma''_{in} C''_{in}}{\gamma'_{in} C'_{in}}\right) \quad (\text{Eq. 95})$$

$$V_{\Omega_{out}} = \left(\sum_{j=0}^n Y_j r'_{out,j} + \sum_{j=0}^n Y_j r_{memb,out,j} + r''_{out} N \right) \times i_{out} \times \left(\frac{1}{N}\right) \quad (\text{Eq. 96})$$

$$V_{memb_{out}} = 2(t_K + t_A - 1) \times \left(\frac{RT}{F}\right) \ln \left(\frac{\gamma''_{out} C''_{out}}{\gamma'_{out,j} C'_{out,j}}\right) \times \left(\frac{1}{N}\right) \quad (\text{Eq. 97})$$

El voltatge de la cel·la V_{cell} es calcula amb l'equació següent [9]:

$$V_{cell} (V/\text{parell}) = V_{\Omega_{in}} + V_{memb_{in}} = V_{\Omega_{out}} + V_{memb_{out}} \quad (\text{Eq. 98})$$

El consum d'energia E s'expressa amb la següent equació [9]:

$$E (kWh/m^3) = \frac{V_{cell} I}{q'_{out}} \times 3600 \times 10^3 \quad (\text{Eq. 99})$$

La recuperació de l'aigua Re és:

$$Re = \frac{q'_{out}}{q'_{in} + q''_{in}} \quad (\text{Eq. 100})$$

La raó de dessalinització (α) és [9]:

$$\alpha = \left(1 - \frac{C'_{out}}{C'_{in}}\right) \quad (\text{Eq. 101})$$

5.2.12. Limitació de la densitat de corrent:

Amb la presència de dissolucions inorgàniques d'electròlits forts, la densitat de corrent límit d'una membrana de bescanvi catiònic és menor, perquè la mobilitat dels contra-ions és menor que per una aniònica. Per tant, la densitat de corrent límit d'una membrana de bescanvi de ions integrada en una cel·la de membranes i_{lim} ve donada per la següent equació empírica establerta per una membrana de bescanvi catiònic [9].

$$i_{lim}(A/cm^2) = \{l_1 + l_2(T/25) + l_3(T/25)^2\} (m_1 + m_2 u'_{out}) C'^{n_1+n_2}_{out} u'_{out} \quad (\text{Eq. 102})$$

Els coeficients presents en l'equació 102, són mesurats experimentalment [9]:

$$l_1 = 0,5950, l_2 = 0,2731, l_3 = 0,1310, m_1 = 83,50, m_2 = 24,00, n_1 = 0,7846, n_2 = 8,612 \cdot 10^{-3}$$

Quan el valor de la densitat de corrent s'igual a la densitat de corrent límit per a una membrana bescanvi catiònica (i_{lim}) a la sortida d'una cel·la dessaladora, la velocitat lineal es converteix en la menor de entre u'_{out} ; $u'^{\#}_{out}$; la densitat de corrent mitja aplicada a l'electrodiàlisi es defineix com el seu corrent límit $(I/S)_{lim}$, com s'expressa en l'equació següent, introduïda de les equacions 96 i 10. [9]

$$\left(\frac{I}{S}\right)_{lim} = \frac{i_{lim}}{\zeta_{out}} = \{l_1 + l_2(T/25) + l_3(T/25)^2\} \frac{(m_1 + m_2 u'^{\#}_{out})}{\zeta_{out}} (C'^{\#}_{out})^{n_1+n_2} u'^{\#}_{out} \quad (\text{Eq.103})$$

On $C'^{\#}_{out}$ és C'_{out} a $u' = u'^{\#}_{out}$.

En l'equació 103, u'_{out} és casi igual a u'_{in} . Substituint $u'_{in} = u'_{out}$ [9];

$$\left(\frac{I}{S}\right)_{lim} = \{l_1 + l_2(T/25) + l_3(T/25)^2\} \frac{(m_1 + m_2 u'_{in})}{\zeta_{out}} (C'_{out})^{n_1+n_2} u'_{in} \quad (\text{Eq. 104})$$

On C'_{out} és C'_{out} a $u' = u'_{in}$, ve donat per [9]:

$$u'_{in} = u'_{in}(1 - 3\sigma) \quad (\text{Eq. 105})$$

On σ és la desviació estàndard de la distribució normal de la relació de velocitat. σ no afecta de manera general al rendiment del cel·la de membranes, però exerceix una influència en la densitat de corrent límit de l'electrodiàlisi. La relació entre $\left(\frac{I}{S}\right)_{lim}$ i C'_{out} ve donada per [9]:

$$\left(\frac{I}{S}\right)_{lim} = \left(\frac{a}{\lambda l}\right) u'_{in} (C'_{in} + C'_{out}) \quad (\text{Eq. 106})$$

Igualant les equacions 104 i 106:

$$Z_1 = \{l_1 + l_2(T/25) + l_3(T/25)^2\} \frac{(C'_{out})^{n_1+n_2} u'_{in}}{C'_{in} + C'_{out}} \quad (\text{Eq. 107})$$

$$Z_2 = \left(\frac{a\zeta_{out}}{\lambda l} \right) \left(\frac{u_{in}^{\#}}{m_1 + m_2 u_{in}^{\#}} \right) \quad (\text{Eq. 108})$$

$$Z_1 = Z_2 \quad (\text{Eq. 109})$$

Per calcular el límit de la densitat de corrent, es realitza un càlcul de proba i error substituint el *control key* $C_{out}^{\#*}$ per $C_{out}^{\#}$ a l'equació 107 per complir $Z_1 = Z_2$ per determinar $C_{out}^{\#} \cdot \left(\frac{I}{S} \right)_{lim}$ es calcula per substitució de $C_{out}^{\#}$ a l'equació 104.

5.2.13. Punts de decisió

La simulació està desenvolupada a partir de les equacions descrites en els capítols anteriors. Està basada uns punts de decisió que s'expliquen a continuació

1. Punt de decisió 1 (Blau):

C_p^* i $C_p^{\prime\prime*}$ (Control Key 1) s'igualen per calcular C_p' i C_p'' , per evitar les referències circulars com:

$$C_p^* = C_p' \quad C_p^{\prime\prime*} = C_p'' \quad (\text{Eq.110})$$

2. Punt de decisió 2 (Violeta):

S'ajusta p^* (Control key 2) per complir:

$$\zeta_{inout} = \zeta_{inp} \quad (\text{Eq. (86)})$$

3. Punt de decisió 3 (Vermell):

S'ajusta $(I/S)^*$ (Control key 3) per igualar V_{cell}^* (Control Key 3) amb V_{cell} :

$$V_{cell}^* = V_{cell} \quad (\text{Eq.111})$$

La figura 15 mostra l'esquema corresponent al programa d'un sol pas (single-pass continuous):

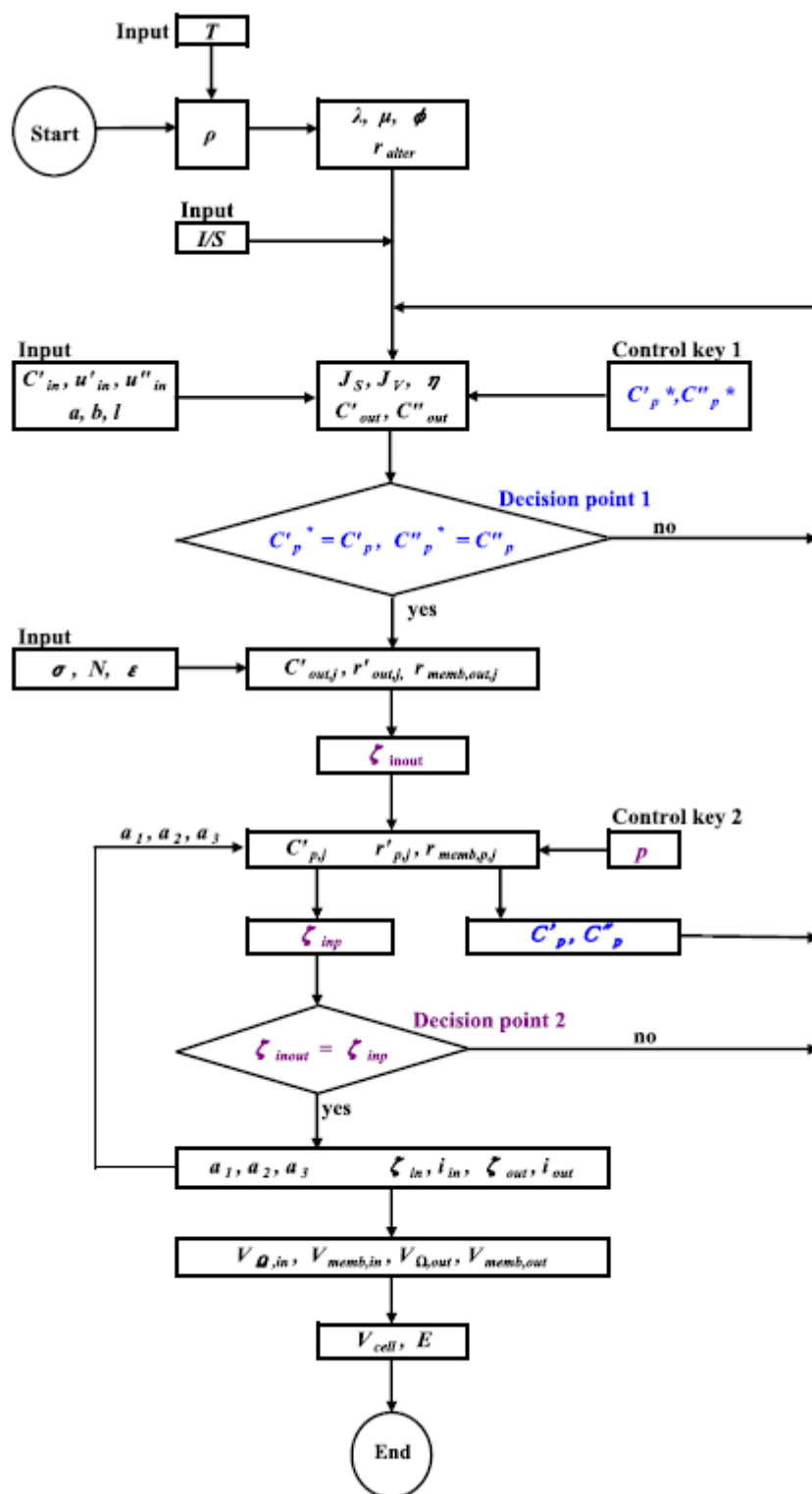


Figura 15. Esquema del programa single-pass a voltatge constant. [9]

5.3.1. Estructura i funcionament

Aprofitant la simulació realitzada en l'apartat anterior de la cel·la de membranes d'un sol pas de flux sense tanc de recirculació, es simularà el mateix programa afegint en aquest cas, la recirculació.

Diagram illustrating the flow and concentration profiles in a continuous flow electrodialysis system. The system consists of a circulation tank and an electrodialyzer.

Legend:

- K ; Cation-exchange membrane
- A ; Anion-exchange membrane
- + ; Anode
- ; Cathode
- De ; Desalting cell
- Con ; Concentrating cell
- Part ; Partition cell

Flow and Concentration Profiles:

- Feeding solution:** Enters the system at concentration C^0 and flow rate Q^0 .
- Desalted solution:** Exits the circulation tank at concentration C'^0 and flow rate Q'^0 .
- Concentrated solution:** Exits the electrodialyzer at concentration C''^0 and flow rate Q''^0 .
- Discharged solution:** Exits the system at concentration C^0 and flow rate Q^0 .

La dissolució salina (concentració, C^0 ; Cabal volumètric, Q^0) es subministra al compartiment I des del tanc d'homogeneïtzació, a més, també es subministra a les cel·les dessaladores (C'_{in} , Q'_{in}). La velocitat lineal en les cel·les dessaladores és u'_{in} a les entrades i u'_{out} a les sortides. La dissolució que surt de les

cel·les dessaladores es retornada al compartiment II del tanc d'homogeneïtzació (C'_{out}, Q'_{out}). Una part de la dissolució dessalinitzada (C'_{out}, Q''') s'extreu del compartiment II al marge del procés. L'altre part de la dissolució ($C'_{out}, Q_{move} = Q'_{in} - Q^0$) es traspasa del compartiment II al compartiment I. El procés és operat mantenint $Q_{move} > 0$. [6]

La dissolució salina també es subministra a les cel·les de concentració ($C^0 = C''_{in}, Q''_{in}$) per prevenir la formació d'incrustacions en les cel·les. La velocitat a les entrades és u''_{in} i u''_{out} a les sortides. Una part de la dissolució s'extreu de les sortides de les cel·les de concentració que posteriorment es subministra a les cel·les dels elèctrodes i a les cel·les de separació (Part), per evitar la influència de les reaccions dels elèctrodes al rendiment de l'electrodialísi. Aleshores, la dissolució és descarregada a l'exterior del procés amb la dissolució residual que surt de les cel·les de concentració. [6]

En el procés multi-etapes, la dissolució dessalinitzada (concentració de sal C'_{out}) extreta de la etapa anterior es subministra al compartiment I en la següent etapa. Amb l'objectiu de mantenir el balanç de matèria en el sistema, Q^0 en la següent etapa ha de ser equivalent a Q''' en l'etapa anterior. [6]

Les especificacions i les condicions d'operació són les mateixes que les descrites en el capítol 5.2. L'estructura de les cel·les dessaladores i de concentració s'il·lustren a la figura 14. El sistema Feed-and-Bleed s'opera a voltatge constant, que es desenvolupa en base en el programa d'un sol pas (Single-pass flow) descrit a l'apartat 5.2.

Hi ha certes equacions que s'han canviat per reproduir el comportament d'aquest sistema, que es mostren a continuació.

5.3.2. Balanç de matèria i consum d'energia en el procés *Feed-and-Bleed*:

El funcionament de l'operació Feed-and-Bleed ve donat pel següent balanç de matèria en el tanc d'homogeneïtzació. El volum d'una dissolució que flueix cap a cel·les dessaladores Q'_{in} i cap a les de concentració Q''_{in} estan definit per [6]:

$$Q'_{in} = abNu'_{in} \quad (\text{Eq.112})$$

$$Q''_{in} = ab(N + 1)u''_{in} \quad (\text{Eq.113})$$

El volum de la dissolució que flueix a la sortida de les cel·les dessaladores Q'_{out} i la de la dissolució que surt del compartiment II en el tanc d'homogeneïtzació són [6]:

$$Q'_{out} = Q'_{in} - SNJ_V \quad (\text{Eq. 114})$$

$$Q''' = Q^0 - SN \quad (\text{Eq. 115})$$

El balanç de matèria en el compartiment I és [6]:

$$C'_{in}Q'_{in} = C'_0Q^0 + C'_{out}(Q'_{in} - Q^0) \quad (\text{Eq.116})$$

El volum de la dissolució d'alimentació Q^0 [6]:

$$Q^0 = \frac{C'_{in} - C'_{out}}{C'_0 - C'_{out}} Q'_{in} \quad (\text{Eq. 117})$$

En el tanc d'homogeneïtzació, el cabal és $Q_{move} = Q'_{in} - Q^0$ de la dissolució que es mou des del el compartiment II al compartiment I. Per tal d'operar el sistema *Feed-and-bleed*, Q^0 ha de ser menor que Q'_{in} [6]:

$$Q_{move} = Q'_{in} - Q^0 > 0 \quad (\text{Eq. 118})$$

El consum d'energia (E) , la recuperació d'aigua (Re), la raó de dessalinització (α) venen donats per [6]:

$$E = \frac{IV_{cell}N}{Q_{move}} = \left(\frac{1}{Q_{move}}\right) \left(\frac{I}{S}\right) SV_{cell}N \quad (\text{Eq. 119})$$

$$Re = \frac{Q'''}{Q^0 + Q''_{in}} \quad (\text{Eq.120})$$

$$\alpha = 1 - \frac{C'_{out}}{C^0} \quad (\text{Eq. 121})$$

5.3.6. Punts de decisió

La simulació inclou cinc punts de decisió [6]:

1. Punt de decisió 1 (Blau):

S'ajusten C'^*_{in} i C'^*_{out} (Control key 1) per complir:

$$C'^*_{out} = C'_{ut} \quad (\text{Eq. 122})$$

2. Punt de decisió 2 (Taronja):

C'^*_{p} i C''^*_{p} (Control key 2) s'igualen per calcular C'_p i C''_p , per evitar referències circulars com:

$$C'^*_{p} = C'_p \quad C''^*_{p} = C''_p \quad (\text{Eq. 123})$$

3. Punt de decisió 2 (Violeta):

S'ajusta p^* (Control key 3) per complir:

$$\zeta_{inout} = \zeta_{inp} \quad (\text{Eq. 124})$$

4. Punt de decisió 3 (Vermell):

S'ajusta $(I/S)^*$ (Control key 4) per igualar V^*_{cell} (Control Key 3) amb V_{cell} :

$$V^*_{cell} = V_{cell} \quad (\text{Eq. 125})$$

5. Punt de decisió 5 (Verd):

Després del càlcul de proba i error en els punts de decisió 1-4, s'introdueix Q'''^* (Control key 5) i s'ajusta N^* (Control key 5) per complir:

$$Q'''^* = Q''' \quad (\text{Eq. 126})$$

A continuació es mostren de manera esquemàtica el programa *Feed-and-Bleed*, en la figura 19.

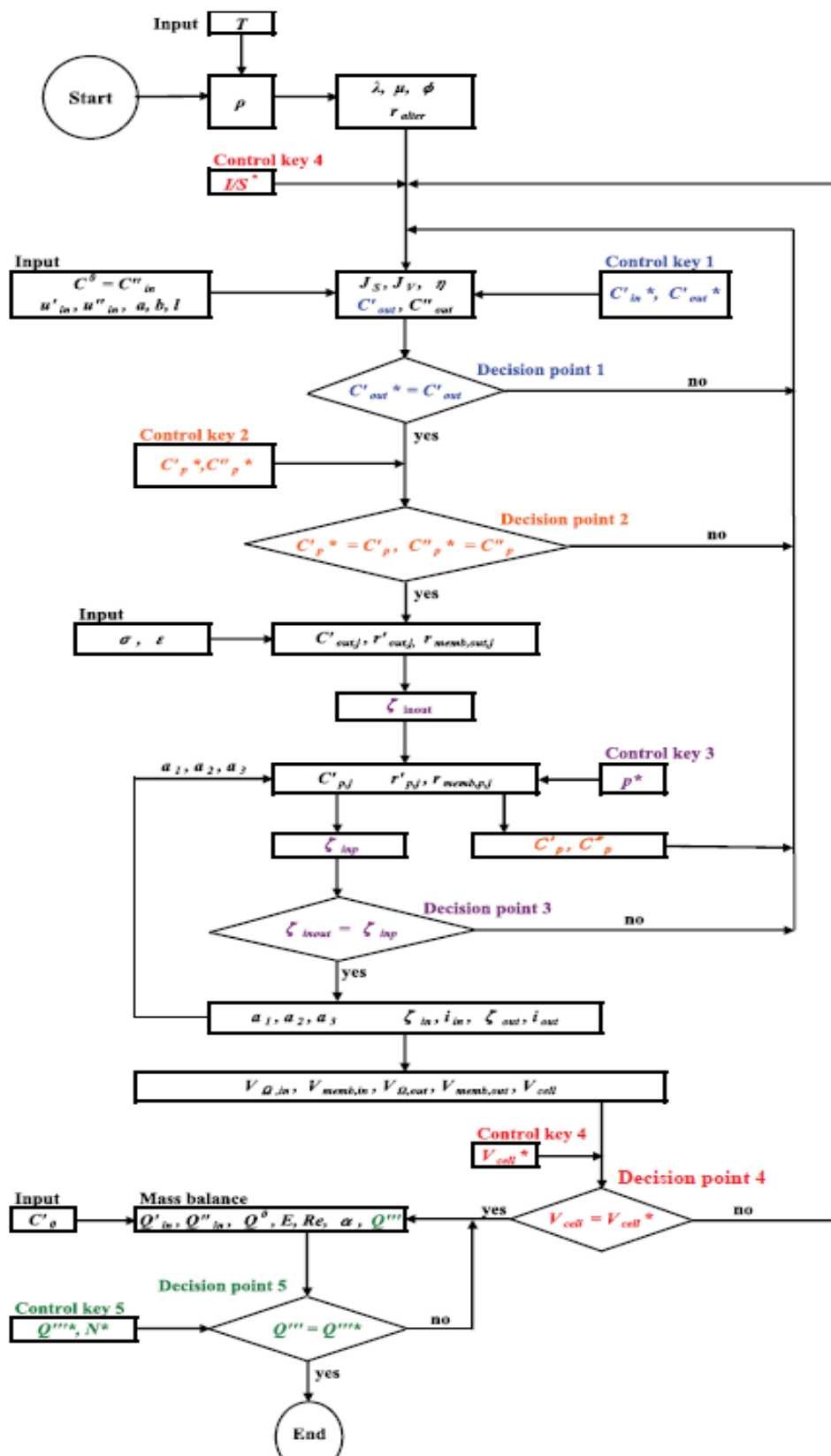


Figura 19. Esquema del programa Feed-and-Bleed. [6]

5.4. Programa Batch

El procés Batch és aplicable en petites-mitjanes plantes de dessalinització per electrodiàlisi. El funcionament d'aquest procés es basa en la cel·la de membranes i el tanc d'homogeneïtzació, aquestes unitats són les mateixes que s'han vist en els capítols anteriors. El programa Batch es divideix en dos passos que expressen la funció de la cel·la de membranes (pas 1) i la del tanc d'homogeneïtzació (pas 2) [13].

Pas 1: La funció de la cel·la de membranes

La simulació *Single-pass continuous* funciona en l'estat estacionari. Tot i això, el procés Batch es realitza en un estat inestable perquè la concentració de sal en les cel·les dessaladores disminueix amb el temps en que s'està produint el procés. Així doncs, la funció que descriu la cel·la de membranes en el procés Batch no es pot escriure directament en el full de càlcul. Al pas 1, aquesta funció que descriu la influència de la concentració de sal i el voltatge de la cel·la en cinc paràmetres, s'introdueixen mitjançant el programa a voltatge constant de *Single-pass* vist en el capítol 5.2. [13]

Pas 2: Funció del tanc d'homogeneïtzació

La concentració de sal en el tanc d'homogeneïtzació també disminueix en funció del temps d'operació. Els canvis s'expressen generalment per una equació integral, que no es pot escriure en el full de càlcul. En el pas 2, l'operació de subministrament de la dissolució de manera instantània està incorporada a la simulació [13].

5.4.1. Esquema i funcionament

La figura 20 il·lustra el procés d'electròlisi Batch. En aquest procés, inicialment la vàlvula V_1 s'obre i un volum definit (Q_0) d'una dissolució de sal (concentració C^0) es subministra al tanc d'homogeneïtzació. Seguidament, V_1 es tanca i s'obre la vàlvula V_2 , la dissolució s'introdueix a les entrades de les cel·les dessaladores (De) pintades de color gris en la il·lustració. La dissolució flueix per aquestes cel·les i es retornada al tanc d'homogeneïtzació. La dissolució d'alimentació també es subministra a les cel·les de concentració. Una part de la dissolució s'extreu de les sortides de les cel·les de concentració i posteriorment es subministra a les cel·les dels elèctrodes i a les cel·les de separació (Part), que estan equipades per evitar la influència de les reaccions dels elèctrodes al rendiment de l'electrodiàlisi. Aleshores, la dissolució es descarregada a l'exterior del procés amb la dissolució residual que surt de les cel·les de concentració.

A continuació, l'electrodiàlisi necessita l'aplicació d'un voltatge constant entre els elèctrodes i la circulació de la dissolució entre les cel·les dessaladores i el tanc. Després de que la concentració de sal

en les cel·les dessaladores disminueix fins a un valor objectiu, V_2 es tanca, V_3 s'obre i la dissolució dessalinitzada es extreta a fora del procés [13].

5.4.4. Especificacions i condicions d'operació:

Les especificacions i les condicions d'operació són les mateixes que les descrites en el capítol anterior (Single-Pass Flow 5.2). L'estructura de les cel·les dessaladores i de concentració s'il·lustren en la figura 14.

5.4.5. Funcionament de la cel·la de membranes, Pas 1:

El funcionament de la cel·la de membranes ve definit per la determinació de la concentració de sal a les entrades de les cel·les dessaladores (C'_{in}) i el voltatge de la cel·la (V_{cell}), els cinc paràmetres (concentració de sal a les sortides de les cel·les dessaladores (C'_{out}), concentració de sal a les sortides de les cel·les de concentració (C''_{out}), velocitat a les sortides de les cel·les dessaladores (u'_{out}), densitat de corrent (I/S) i el flux d'ions a través del parell de membranes (J_s) [13]. Aquests paràmetres es calculen utilitzant el programa de voltatge constant d'un sol pas (*Single-pass continuous*) descrit en el capítol 5.2

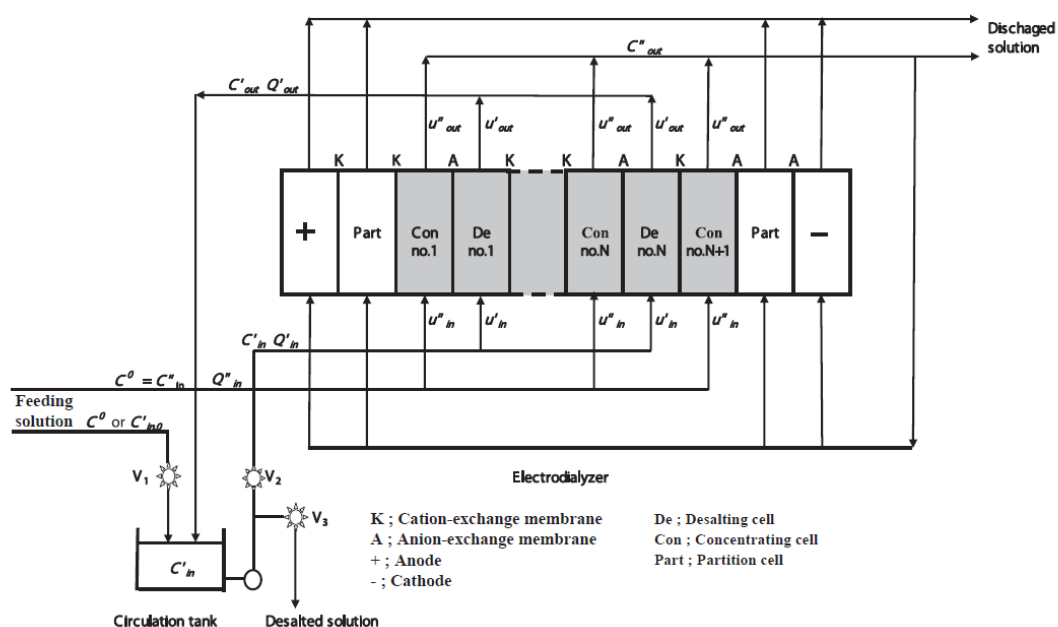


Figura 20. Esquema del sistema Batch. K: membrana de bescanvi catiònic; A: membrana de bescanvi aniònic; +: Ànode; -: Càtode; De: Cel·la dessaladora; Con: Cel·la de concentració; Part: Cel·la de partició. [13]

Les relacions entre C'_{in} , V_{cell} i els cinc paràmetres (C'_{out} , C''_{out} , u'_{out} , I/S i J_S) venen donades per les següents equacions [13]:

$$C'_{out} = \{\alpha_1 - \alpha_2 V_{cell}^{0,5}\} C'_{in} \quad (\text{Eq. 127})$$

$$C''_{out} = C^0 - (\beta_1 - \beta_2 C_{cell}^{0,5}) V_{cell}^{0,9} \quad (\text{Eq. 128})$$

$$u'_{out} = \gamma_1 + \gamma_2 V_{cell}^{1,4} - \gamma_3 V_{cell}^{0,9} C_{cell}^{0,8} \quad (\text{Eq.129})$$

$$I/S = (\delta_1 C_{cell}^{0,8} - \delta_2) V_{cell}^{0,9} \quad (\text{Eq. 130})$$

$$J_S = (\varepsilon_1 C_{cell}^{0,8} - \varepsilon_2) V_{cell}^{0,9} \quad (\text{Eq. 131})$$

Els onze coeficients (α_1 , α_2 , β_1 , β_2 , γ_1 , γ_2 , γ_3 , δ_1 , δ_2 , ε_1 i ε_2) es calculen experimentalment [13]:

Taula 2. Coeficients experimentals. Font: [13]

α_1	1,288	γ_1	10,00	δ_2	$2,228 \cdot 10^{-3}$
α_2	1,087	γ_2	$8,451 \cdot 10^{-3}$	ε_1	$4,036 \cdot 10^{-10}$
β_1	2116	γ_3	$1,3178 \cdot 10^{-4}$	ε_2	$2,113 \cdot 10^{-8}$
β_2	44,47	δ_1	$4,288 \cdot 10^{-5}$		

5.4.6. Relació entre el temps d'operació i el funcionament de la cel·la de membranes, Pas 2:

Les equacions es desenvolupen incorporant una cel·la d'alimentació imaginària, Fe, i un obturador, Sh, a la sortida del tanc d'homogeneïtzació, com s'il·lustra en la figura 21 on un volum definit (Q_0) de dissolució (concentració de sal: (C^0 o $C'_{in,0}$)) es disposada al principi [13].

Per procedir amb la simulació, el temps operacional t es divideix en intervals de Δt min. L'obturador simula un sistema de obert/tancat imaginari i repetitiu i es proporciona un cabal Q'_{in} de dissolució des del tanc d'homogeneïtzació cap a les cel·les dessaladores a través de les cel·les d'alimentació en un interval de temps Δt min [13].

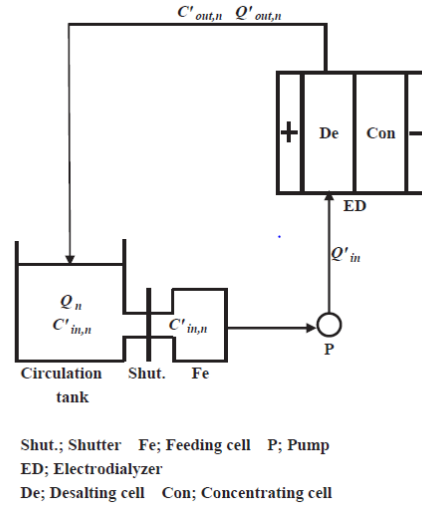


Figura 21. Esquema sistema obert/tanca. Shut: Obturador; Fe: Solució d'alimentació; P: bomba; ED: cel·la de membranes; De: Cel·la dessaladora; Con: Cel·la de concentració. [13]

Les equacions per determinar el cabals [13]

$$Q'_{in} = (dm^3/\Delta t \text{ min}) = abNu'_{in} \times (60\Delta t) \cdot 10^{-3} \quad (\text{Eq. 132})$$

$$Q'_{out} = (dm^3/\Delta t \text{ min}) = abNu'_{out} \times (60\Delta t) \cdot 10^{-3} \quad (\text{Eq. 133})$$

Els temps d'operació es distribueix en n passos d'interval Δt . La dissolució en el tanc d'homogeneïtzació es mescla rigorosament aconseguint que la seva concentració sigui la mateixa que la present en les cel·les d'alimentació i en les entrades de la cel·la de membranes (cel·les dessaladores) (C'_{in}). La taula 2

mostra els canvis en el tanc d'homogeneïtzació (cel·la d'alimentació) ($C'_{in,n}$), a les sortides de les cel·les de membranes ($C'_{out,n}$) i el volum de la dissolució en el tanc d'homogeneïtzació (Q_n) en cada un dels temps d'operació n [13]. Els balanços de massa i volum en el tanc d'homogeneïtzació es mostren a continuació:

Aleshores, per $n=n$, els balanços màssic i volumètric seran [13]:

$$C'_{in,n} = \frac{C'_{in,n-1}Q_{n-1} - C'_{in,n-1}Q'_{in} + C'_{out,n-1}Q'_{out,n-1}}{Q_n} \quad (\text{Eq. 134})$$

$$Q_n = Q_{n-1} - Q'_{in} + Q'_{out,n-1} \quad (\text{Eq. 135})$$

Es calculen $C'_{out,n}$ i $(I/S)_n$ substituint $C'_{in,n}$ i V_{cell} en les equacions 127 i 129 i Es calculen $(I/S)_n$ i $J_{S,n}$ utilitzant les equacions 130 i 131. La densitat de corrent mitjana $(I/S)_{average}$ es calcula mitjançant l'equació següent [13]:

$$(I/S)_{average} = \frac{\sum_{n=1}^n (I/S)_n}{n} \quad (\text{Eq. 136})$$

L'eficiència η_n , la raó de dessalinització (α_n), la recuperació d'aigua (Re_n) i el consum energètic (E_n) es calculen mitjançant [13]:

$$\eta_n = \frac{F \sum_{n=1}^n J_{S,n}}{\sum_{n=1}^n (I/S)_n} \quad (\text{Eq. 137})$$

$$\alpha_n = 1 - \frac{C'_{in,n}}{C'_{in,0}} \quad (\text{Eq. 138})$$

$$Re_n = \frac{Q_n}{Q_0 + Q'_{in} \times t} \quad (\text{Eq. 139})$$

$$Q''_{in} = ab(N + 1)u''_{in} \times (60s/min) \cdot 10^{-3} \quad (\text{Eq. 140})$$

$$E_n (kWh/m^3) = \frac{SNV_{cell}(I/S)_{average} (A/cm^3) \cdot 10^{-3}}{\frac{Q_n}{t} (60min/h) \cdot 10^{-3}} \quad (\text{Eq. 141})$$

5.5. Programa de dessalinització per la producció de sal i conservació del medi marí

5.5.1. Estructura y funcionament

La salmorra descarregada de l'osmosi inversa es concentra mitjançant electrodiàlisis mitjançant membranes d'intercanvi iònic per arribar a la saturació i, així produir sal per ús industrial. D'aquesta manera s'evita descarregar una salmorra concentrada al mar i s'evita l'impacte mediambiental en els ecosistemes marins.

El sistema de dessalinització, il·lustrat en la figura 22 consta d'una dissolució de concentració C'_{in} i una velocitat de u'_{in} que es subministra a les cel·les dessaladores, de separació i a les dels elèctrodes. La dissolució concentrada es circula entre les cel·les de concentració a una velocitat d'entrada de u''_{in} i el tanc d'homogeneïtzació mentre que es subministra un corrent elèctric (I) a través dels elèctrodes. La concentració de sal en les cel·les de concentració i en el tanc d'homogeneïtzació augmenten en funció del temps fins establitzar-se, passa el mateix amb la concentració en les cel·les de concentració (C'') i la concentració a les sortides de les cel·les dessaladores (C'_{out}) [2] .

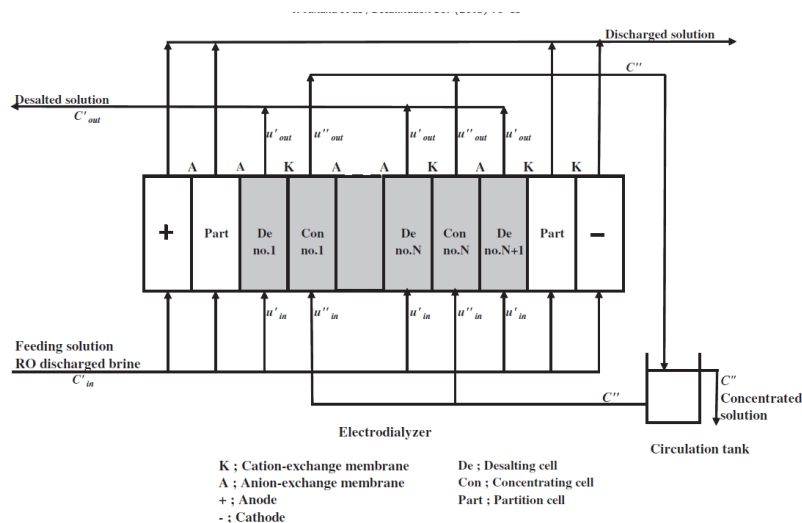


Figura 22. Esquema del sistema d'electrodiàlisis de la simulació 6. K: Membrana de bescanvi catiónic; A: Membrana de bescanvi aniónic; +: Ànode; -: Càtode; De: Cel·la dessaladora; Con: Cel·la de concentració; Part: Cel·la de partició. [2]

Les equacions utilitzades per aquesta simulació són les mateixes que les utilitzades en el capítol 5.2 excepte les equacions relacionades amb la concentració de sal, la velocitat en les cel·les, la dissipació del corrent elèctric, el consum energètic, les caigudes de pressió en les cel·les i ranures que es mostraran a continuació.

5.5.2. Concentració de sal i velocitat de la dissolució en les cel·les

S'assumeix que la concentració en les cel·les dessaladores canvia linealment des de les entrades a les sortides, la concentració de sal mitjana C' (eq/cm³) s'expressa amb l'equació següent [2]:

$$C' = (C'_{in} + C'_{out})/2 \quad (\text{Eq. 142})$$

En les cel·les de concentració, la concentració de sal es uniforme i ve donada per:

$$C'' = J_S/J_V = \frac{1}{2\rho} (\sqrt{A^2 + 4\rho B} - A) \quad (\text{Eq. 143})$$

On:

$$A = \phi i + \mu - \rho C' \quad (\text{Eq. 144})$$

$$B = \lambda i + \mu C' \quad (\text{Eq. 145})$$

La velocitat mitjana u' (cm/s) en les cel·les dessaladores [2]:

$$u' = (u'_{in} + u'_{out})/2 \quad (\text{Eq. 146})$$

u'_{out} i u''_{out} es calculen utilitzant les següents equacions.

$$u'_{out} = u'_{in} - (l/a')J_V \quad (\text{Eq. 147})$$

$$u''_{out} = u''_{in} - (l/a'')J_V \quad (\text{Eq. 148})$$

On, a' i a'' són els gruixos de les cel·les dessaladores i de concentració respectivament.

C'_{out} és calcula amb la següent equació:

$$C'_{out}u'_{out} = C'_{in}u'_{in} - (l/a')J_S \quad (\text{Eq. 149})$$

5.5.3. Fuites de corrent elèctric

En aquest sistema es tenen en compte les fuites de corrent elèctric. En una cel·la de membranes una part del corrent elèctric no flueix a través de les membranes de bescanvi sinó que passa per el conjunt de ranures i conductes de les cel·les. L'estructura de les cel·les s'il·lustra en la figura 14. La fuga de corrent elèctric és un fenomen inevitable que provoca la disminució de l'eficiència i augmenta substancialment el consum energètic. Per tant, la resistència elèctrica de les ranures r_s (Ω) i dels conductes r_d s'obté mitjançant la equació següent [2]:

$$\frac{1}{r_s} = \frac{1}{r'_s} + \frac{1}{r''_s} = \left(\frac{1}{r'_{s,in}} + \frac{1}{r'_{s,out}} \right) + \left(\frac{1}{r''_{s,in}} + \frac{1}{r''_{s,out}} \right) \quad (\text{Eq. 150})$$

$$\frac{1}{r_d} = \left(\frac{1}{r'_{d,in}} + \frac{1}{r'_{d,out}} \right) + \left(\frac{1}{r''_{d,in}} + \frac{1}{r''_{d,out}} \right) \quad (\text{Eq. 151})$$

La resistència elèctrica a les ranures es dona per les següents equacions [2].

Per a l'entrada de les cel·les dessaladores;

$$r'_{s,in} = \frac{h'_s}{k'_{in} a' w' n' (1 - \varepsilon')} \quad (\text{Eq. 152})$$

I per les sortides de les cel·les dessaladores:

$$r'_{s,out} = \frac{h'_s}{k'_{out} a' w' n' (1 - \varepsilon')} \quad (\text{Eq. 153})$$

A les entrades de les cel·les de concentració:

$$r''_{s,in} = \frac{h''_s}{k''_{in} a'' w'' n'' (1 - \varepsilon'')} \quad (\text{Eq. 154})$$

I a les sortides de les cel·les de concentració:

$$r''_{s,out} = \frac{h''_s}{k''_{out} a'' w'' n'' (1 - \varepsilon'')} \quad (\text{Eq. 155})$$

On k és la conductivitat específica en la dissolució, h (cm) i w (cm) són la llargada i amplada de la ranura respectivament. N és el número de ranures en les cel·les dessaladores. ε és la relació de volum de l'espaiador.

Les resistències elèctriques en els conductes venen donades per les següents equacions [2].

A les entrades de les cel·les dessaladores:

$$r'_{d,in} = \frac{a' + a'' + \tau_K + \tau_A}{k'_{in} w' h'_d n'} \quad (\text{Eq. 156})$$

A les sortides de les cel·les dessaladores:

$$r'_{d,out} = \frac{a' + a'' + \tau_K + \tau_A}{k'_{out} w' h'_d n'} \quad (\text{Eq. 157})$$

A les entrades de les cel·les de concentració:

$$r''_{d,in} = \frac{a' + a'' + \tau_K + \tau_A}{k''_{in} w'' h''_d n''} \quad (\text{Eq. 158})$$

A les sortides de les cel·les de concentració:

$$r''_{d,out} = \frac{a' + a'' + \tau_K + \tau_A}{k''_{out} w'' h''_d n''} \quad (\text{Eq. 159})$$

On a les equacions anteriors, $a' + a'' + \tau_K + \tau_A$ es la dimensió del conducte.

A més, es defineixen les següents expressions per calcular la relació de la resistència elèctrica total en la ranura $r_s^\#$ i en el conducte $r_d^\#$ [2]:

$$r_s^\# = \frac{r_s}{r_{cellpair}} \quad (\text{Eq. 160})$$

$$r_d^\# = \frac{r_d}{r_{cellpair}} \quad (\text{Eq. 161})$$

On $r_{cellpair}$ és la resistència elèctrica:

$$r_{cellpair}(\Omega) = (r' + r'' + r_{memb}) \frac{1}{S} \quad (\text{Eq. 162})$$

La relació de la fuga de corrent elèctric aplicant Kirchhoff al circuit equivalent és:

$$\frac{I_L}{I} = \frac{2(N+1)(N+2)}{24r_s^\# + 3(1+r_d^\#)N(N+2)} \quad (\text{Eq. 163})$$

5.5.4. Punts de decisió

Els punts de decisió que es poden observar en l'esquema de la figura 23 en aquesta simulació són els següents [2]:

1. Punt de decisió 1:

$$C'_{out} = C'^*_{out} \quad (\text{Eq. 164})$$

Es substitueix temptativament un valor per C'^*_{out} per tal de determinar el valor C'_{out} .

2. Punt de decisió 2:

El corrent efectiu I^* que passa a través de les cel·les de membranes disminueix degut a les fuites de corrent elèctric I_L , I^* es defineix amb:

$$C'_{out} = I^* = iS = I - I_L = I\left(1 - \frac{I_L}{I}\right) \quad (\text{Eq. 165})$$

On I és el corrent aplicat als elèctrodes. Aquest punt de decisió consisteix en determinar un valor temptatiu de I^* per complir l'equació 165.

L'esquema del programa és el següent:

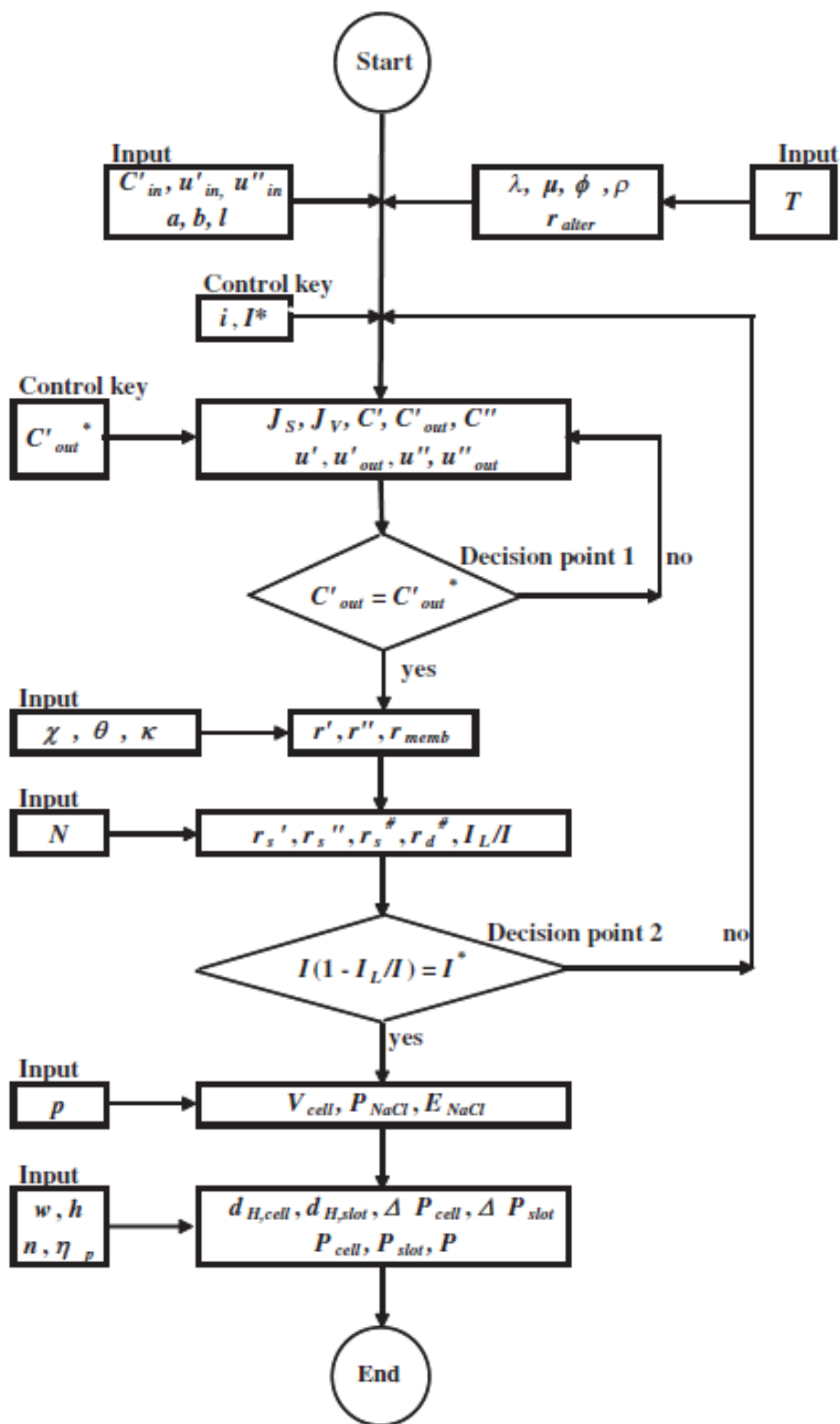


Figura 23. Esquema del programa. [2]

6. Execució dels models. Anàlisi i discussió dels resultats

6.1. Resultats del algoritme de simulació de la configuració de voltatge constant d'un sol pas (*single-pass continuous*)

Per a procedir a executar el model, s'han de suposar uns determinats valors per als paràmetres i les condicions d'operació definits com inputs. Aquests es mostren en la taula 3.

Taula 3. Especificacions i condicions d'operació de les diferents simulacions. [2]

Especificació i condicions d'operació	
Gruix de les cel·les dessaladores i de concentració; a	0,05 cm
Amplada de les cel·les dessaladores i de concentració; b	100 cm
Llargada de les cel·les dessaladores i de concentració; l	100 cm
Número de parells de cel·les, N	300
Velocitat a l'entrada de les cel·les dessaladores; u'_{in}	10 cm/s
Velocitat a l'entrada de les cel·les de concentració; u''_{in}	1 cm/s
Temperatura; T	25°C
Desviació estàndard de la distribució normal de la relació de la velocitat de la solució; σ	0,1
Distància entre varetes; x	0,3 cm
Angle de creuament de les varetes: θ	$\frac{\pi}{3} \text{ rad}$
Número de ranures en una cel·la dessaladora; n'	5
Número de ranures en una cel·la de concentració; n''	2

Ample de les ranures en les cel·les dessaladores; w'	4 cm
Ample de les ranures en les cel·les de concentració; w'	2 cm
Llargada de les ranures en les cel·les dessaladores; h'	4 cm
Llargada de les ranures en les cel·les de concentració; h'	4 cm

Prenen com a concentració a l'entrada de les cel·les dessaladores i de concentració de 2000 mg/L i variant el voltatge de la cel·la. Es simula l'electrodiàlisi a 0,2 ; 0,4; 0,6; 0,7 i 0,8 V i, en aquest projecte s'estudien el flux d'ions (J_S), el flux de dissolució (J_V), la concentració a la sortida de les cel·les dessaladores (C'_{out}) i de concentració (C''_{out}), la densitat de corrent (I/S), el consum energètic (E) i l'eficiència (η) degut a que són els paràmetres més representatius del sistema de dessalinització.

Els resultats dels fluxos d'ions i dissolució a través de les membranes de bescanvi es representen en la figura 1.

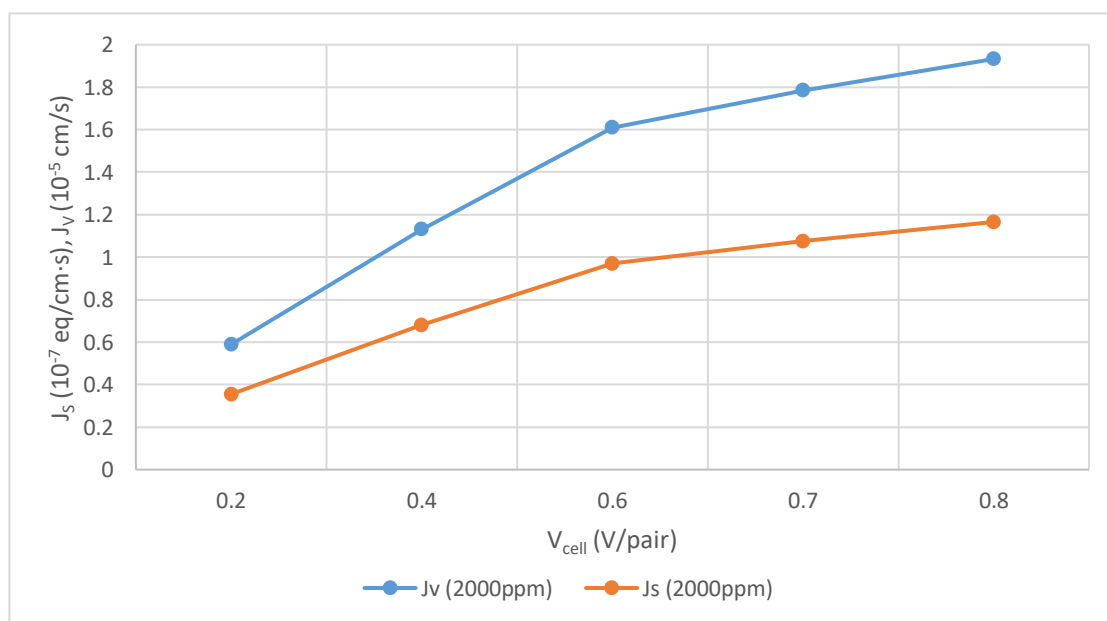


Figura 1. Flux d'ions i flux de dissolució a diferents voltatges ($C'_{in} = C''_{in} = 2000$ mg/L; $u'_{in} = 10$ cm/s i $u''_{in} = 1$ cm/s)

Al gràfic 2 es recullen els resultats obtinguts de les concentracions a la sortida de les cel·les dessaladores i de concentració.

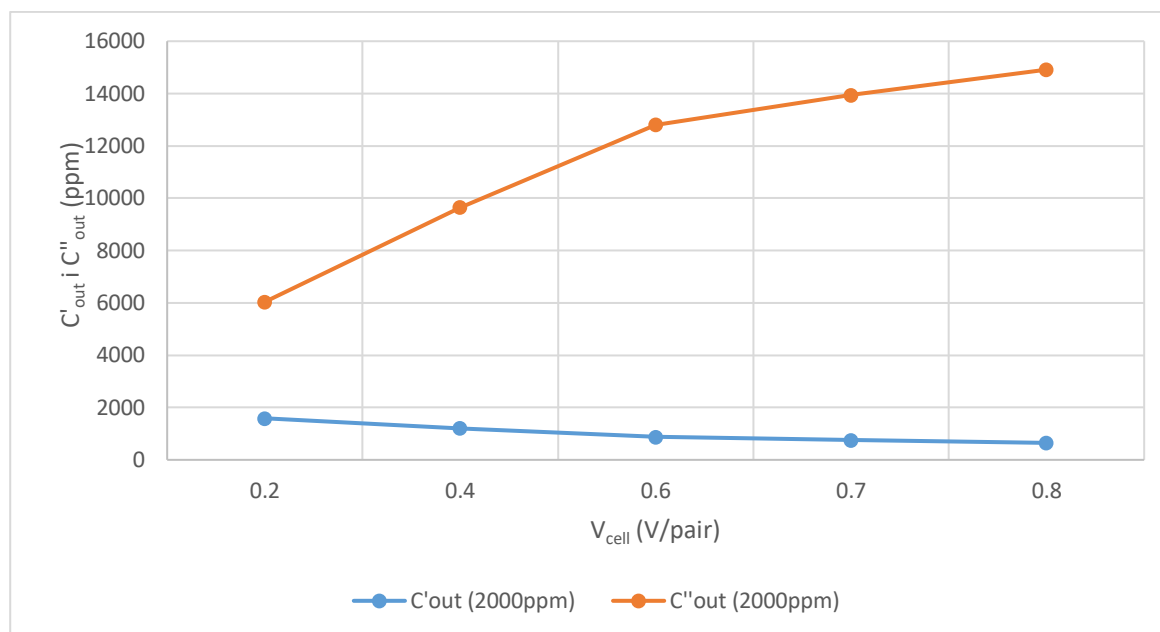


Figura 2. Concentració a la sortida de les cel·les dessaladores i de concentració a diferents voltatges ($(C'_{in}=C''_{in}=2000 \text{ mg/L}; u'_{in}=10 \text{ cm/s}$ i $u''_{in}=1 \text{ cm/s})$

Finalment, els resultats relacionats amb la densitat de corrent, consum energètic i eficiència es recullen en el gràfic 3.

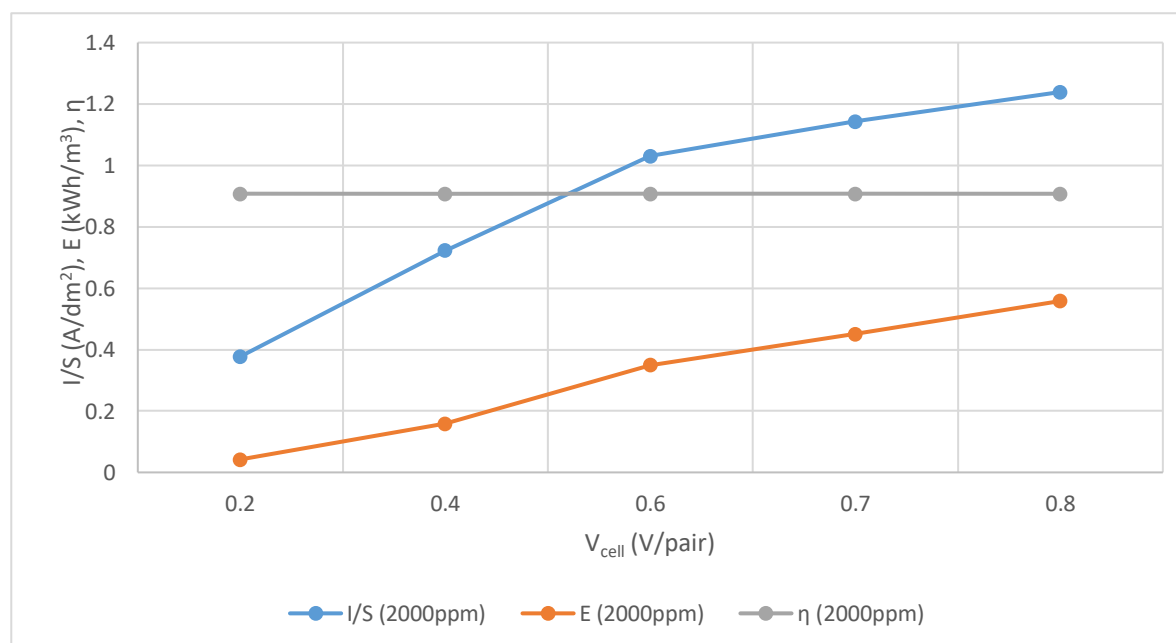


Figura 3. Densitat de corrent, consum energètic i eficiència ($C'_{in}=C''_{in}=2000 \text{ mg/L}; u'_{in}=10 \text{ cm/s}$ i $u''_{in}=1 \text{ cm/s}$)

En al gràfic 1 es representen els fluxos de ions i de la dissolució a diferents voltatges, es pot observar com a mesura que s'augmenta la intensitat de corrent i conseqüentment, el voltatge augmenta el flux d'ions i també el flux de la dissolució a través de les membranes de bescanvi iònic. A mesura que es va augmentant la intensitat de corrent, els fenòmens de migració iònica augmenten i per tant, la concentració del corrent de sortida de les cel·les de concentració és superior, com es pot comprovar en la figura 2. Tot i això, quan es realitza l'electrodiàlisi amb una intensitat molt elevada, el augment de la concentració de producte pot arribar a ser poc significatiu en comparació amb l'energia consumida per dur a terme el procés com s'observa en la figura 3.

Observant l'eficiència, s'observa que no hi ha una variació significativa i l'eficiència a diferents intensitats de corrent és aproximadament del 90%.

Un cop obtinguts els resultats per a una concentració d'entrada de 2000 mg/L, s'obtenen els resultats per a concentracions d'entrada ($C'_{in} = C''_{in}$) de 5000 mg/L i 10000 mg/L que es mostren a continuació.

Respecte als resultats dels fluxos d'ions i dissolució s'obtenen els resultats en al gràfic 4, juntament es representen els resultats obtinguts amb una concentració de 2000 mg/L.

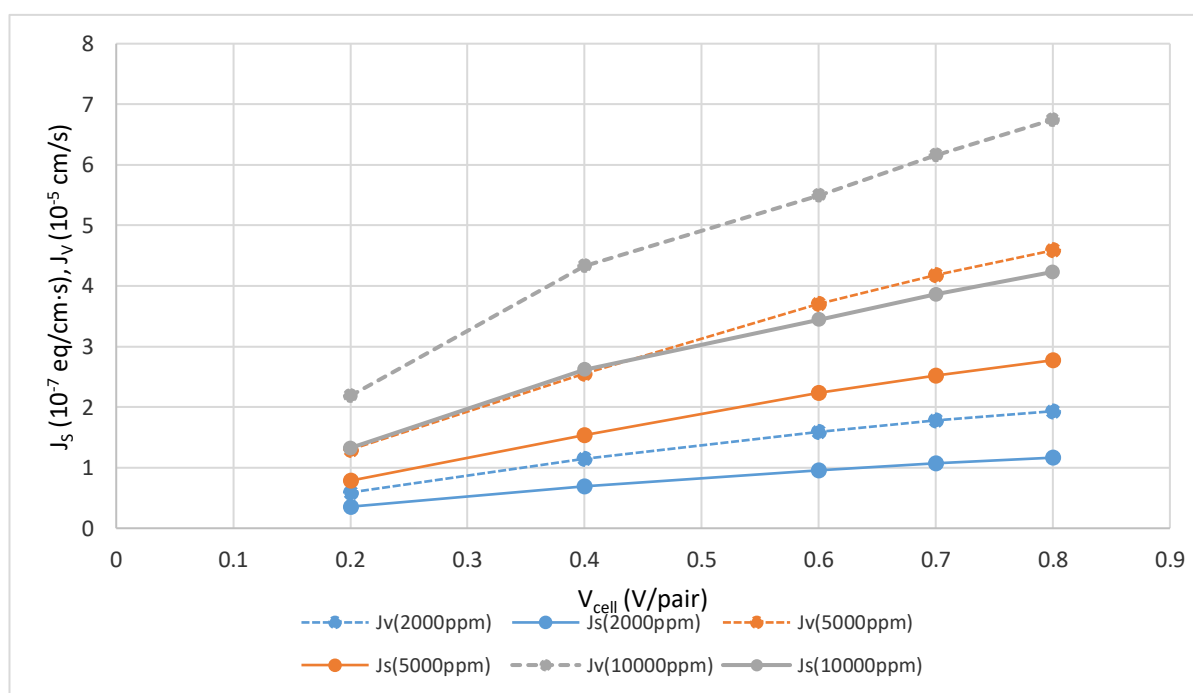


Figura 4. Flux d'ions i de concentració a diferents concentracions d'entrada ($u'_{in}=10\text{cm/s}$ i $u''_{in}=1\text{ cm/s}$)

Com s'observa en la figura 4, a mesura que s'augmenta la concentració del corrent d'alimentació en les cel·les dessaladores i de concentració, el flux d'ions i dissolució augmenta considerablement. Tenint en compte que s'ha realitzat la simulació a diferents voltatges, s'observa que a mesura que s'augmenta aquest, el fluxos augmenten.

Els resultats de l'anàlisi de sensibilitat de les concentracions a les sortides se mostren en la figura 5.

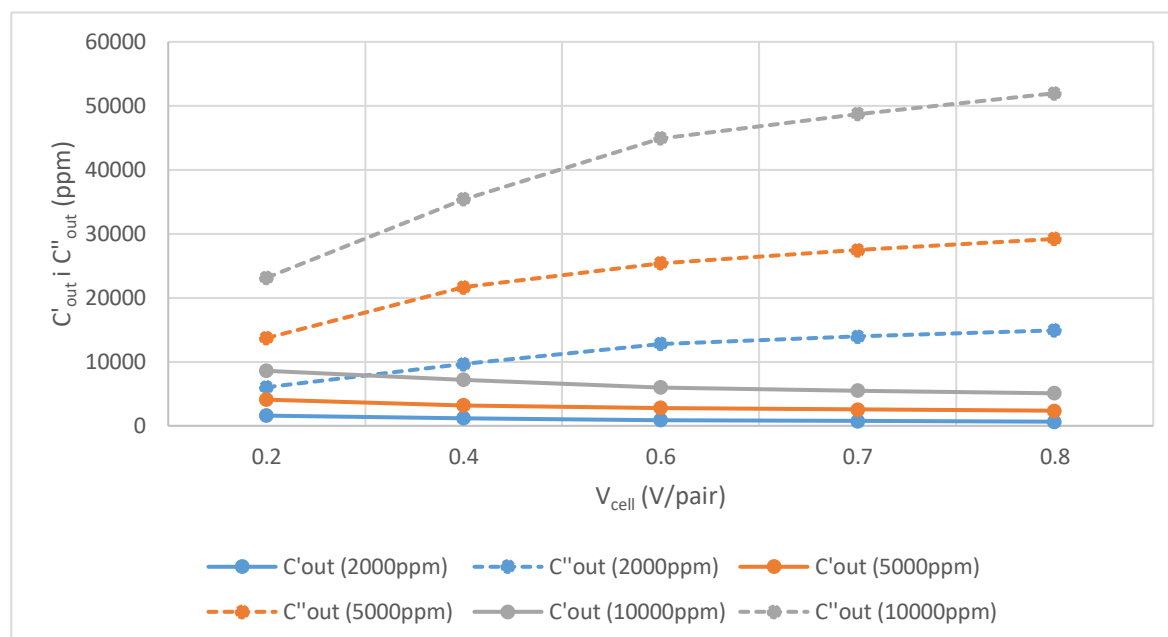


Figura 5. Concentració a la sortida de les cel·les dessaladores i de concentració a diferents concentracions d'entrada ($u'_{in}=10\text{cm/s}$ i $u''_{in}=1\text{ cm/s}$)

Els percentatges de reducció de la concentració en les cel·les dessaladores es representen en la figura 6.

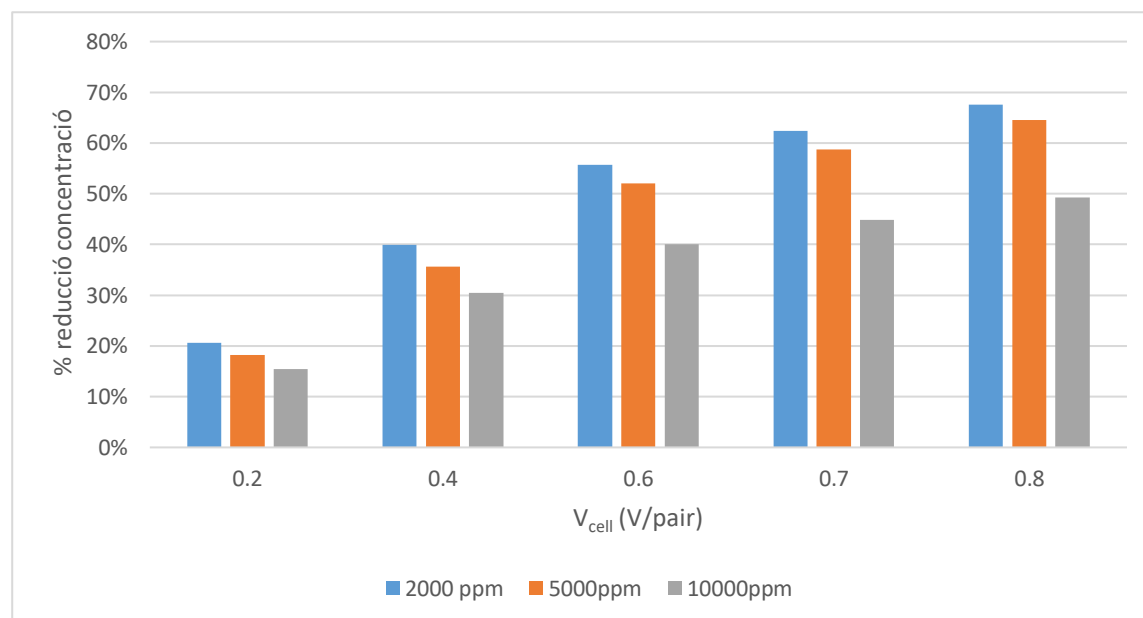


Figura6. Percentatges de reducció de concentració en les cel·les dessaladores en funció dels voltatges

Respecte la concentració a les sortides de les cel·les dessaladores i de concentració, fixant-nos en la concentració de l'aigua dessalinitzada (concentració a la sortida de les cel·les dessaladores), s'observa

que la concentració de sal a 0,2V i a una concentració d'entrada de 2000 mg/L la reducció de la concentració es de aproximadament un 20%, amb una concentració de 5000 mg/L és del 18% i amb una concentració d'entrada de 10000mg/L és d'aproximadament el 15%. A mesura que s'augmenta el voltatge, el percentatge de reducció de sal augmenta notablement, obtenint una reducció del voltant del 65% per concentracions de 2000 i 5000mg/L i del 50% per concentracions d'entrada de 1000mg/L. Per tant, observant els resultats, el model de *single-pass* permet obtenir un bons resultats en quan a la reducció, tenint en compte, que a concentracions altes, el sistema no es capaç de dessalinitzar més d'un 50% de la concentració d'entrada.

Finalment, els resultats referits a la densitat de corrent, consum energètic i eficiència a diferents concentracions d'entrada es mostren al gràfic 7.

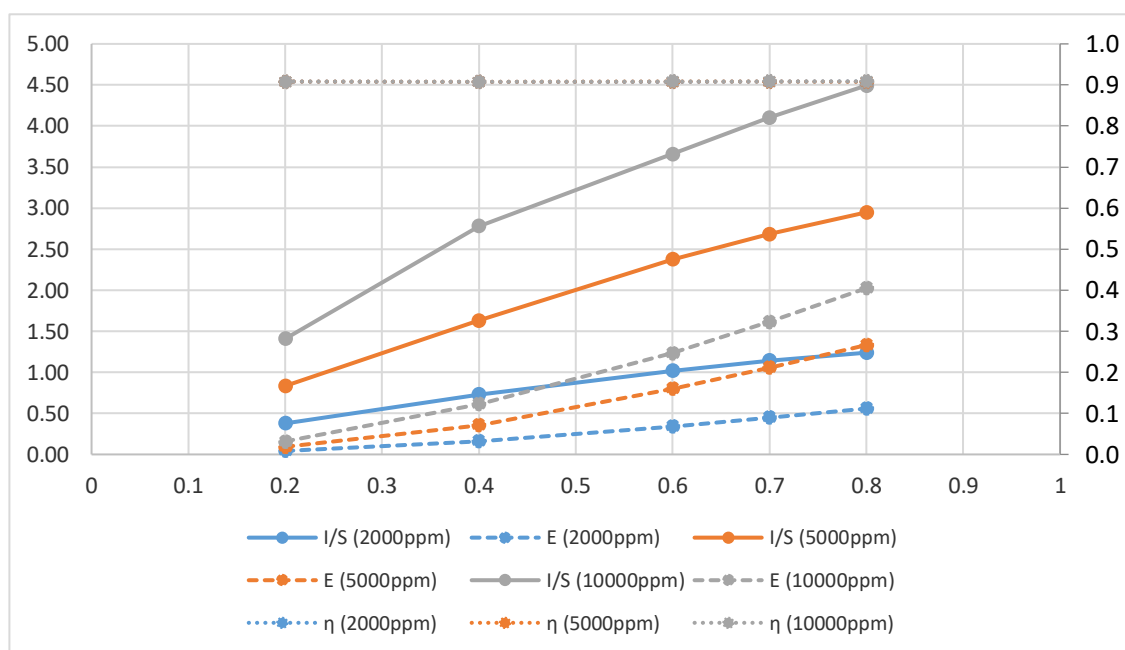


Figura 7. Densitat de corrent, consum energètic i eficiència a diferents concentracions ($u'_{in}=10\text{cm/s}$ i $u''_{in}=1\text{cm/s}$)

Finalment, observant la figura 7, s'observa que a majors concentracions, el consum energètic és major. Aquest resultat es coherent degut a que cal més energia per dessalinitzar. L'eficiència independentment del voltatge aplicat i de la concentració d'entrada és d'aproximadament el 90%.

6.2. Resultats del algoritme de simulació de la configuració “feed-and-bleed”

Amb les especificacions i condicions d'operació mostrades en la taula 3 i les equacions del model mostrades en el capítol 5.2, es procedeix a realitzar la simulació del programa.

En aquest programa l'objectiu es realitzar la dessalinització per l'obtenció d'aigua potable a voltatge constant, tal com s'ha realitzat en la simulació anterior, es realitza l'estudi a 0,2, 0,4, 0,6, 0,7 i 0,8V a una concentració d'entrada a les cel·les dessaladores i de concentració de 2000, 5000 i 10000 mg/L.

A diferència de la simulació *single-pass*, en aquest cas, es pren com a objectiu l'obtenció d'un cabal de 30 m³/h amb una concentració de 400 mg/L (aigua potable). A continuació es mostren els resultats obtinguts en aquesta simulació.

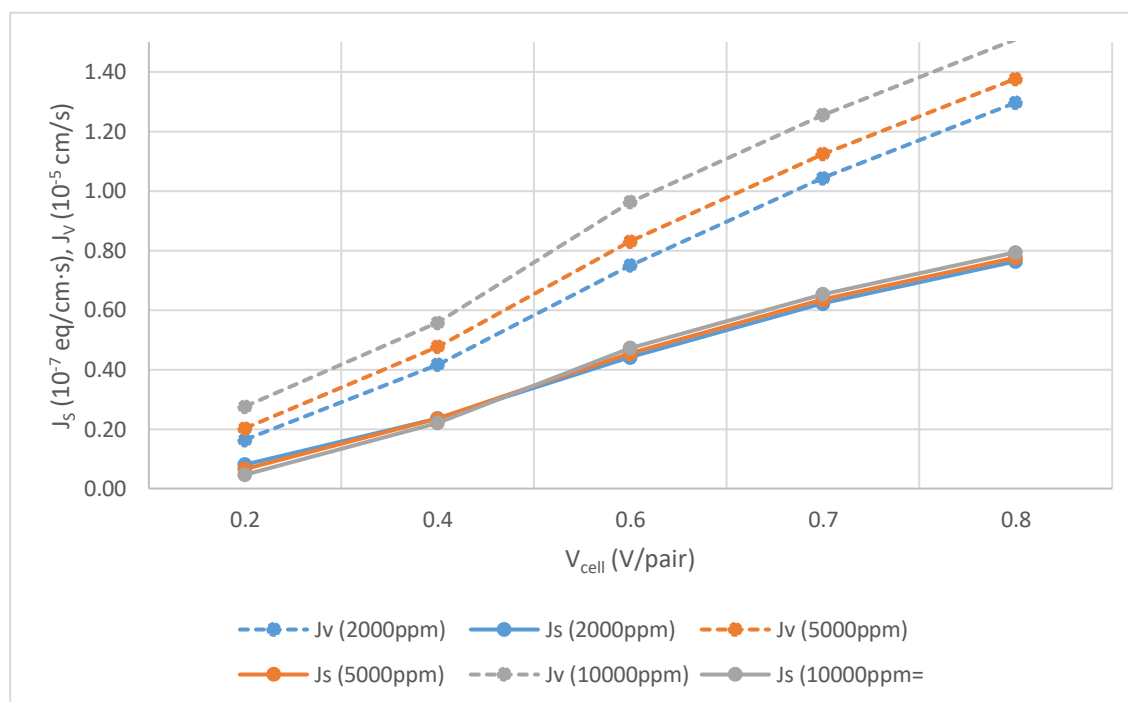


Figura8. Flux d'ions i de concentració a diferents concentracions d'entrada ($u'_{in}=10$ cm/s i $u''_{in}=1$ cm/s). Sistema feed-and-bleed

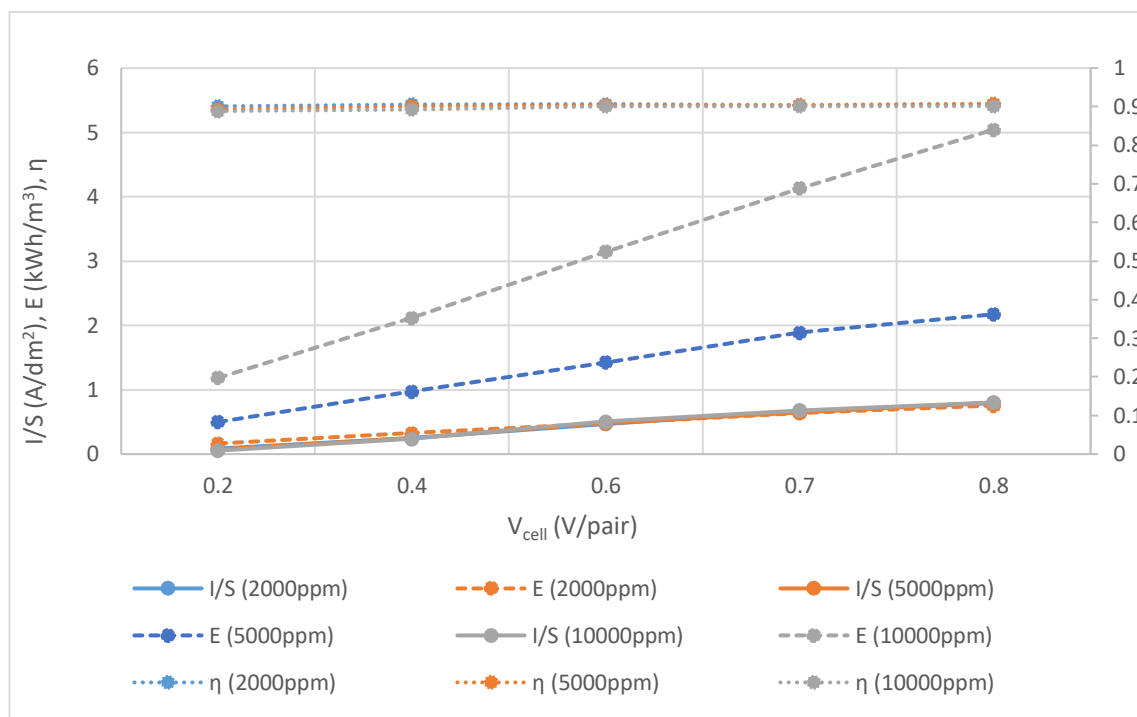


Figura9..Densitat de corrent, consum energètic i eficiència a diferents concentracions($u'_{in}=10\text{cm/s}$ i $u''_{in}=1\text{ cm/s}$). Sistema Feed-and-bleed

La figura 11 mostra la relació entre el voltatge aplicat a les cel·les i la densitat de corrent a diferents concentracions d'entrada. Es pot observar que la densitat de corrent aplicada és independent de la concentració d'entrada, mentre que la densitat de corrent i el voltatge tenen una relació gairebé lineal.

Al gràfic 11 també es representa el consum energètic en funció del voltatge, s'observa que el consum energètic augmenta en funció del voltatge aplicat. A concentracions d'entrada altes, el consum energètic és superior que a concentracions baixes. Això té coherència degut a que el sistema necessita més energia per dessalinitzar una concentració d'entrada de 1000 mg/L que una de 2000 mg/L, tal com es comenta per el programa *Single-pass*.

En aquest programa independentment del voltatge aplicat i la concentració a les entrades, el sistema es capaç de reduir un 90% la concentració de sal, ja que s'estableix com a paràmetre l'obtenció d'un corrent producte amb una concentració de 400 mg/L. El fet d'establir aquest objectiu veu reflectit en el consum energètic.

6.3. Resultats del algoritme de simulació de la configuració “Batch”

6.3.1. Estudi del efecte del voltatge

Simulant el sistema Batch amb les concentracions d'entrada a 2000 mg/L i als voltatges de 0,2, 0,4, 0,6, 0,7 i 0,8V. Establint un Δt de 4 min durant un temps d'operació de 60 minuts els resultats obtinguts es presenten a continuació.

Els resultats de la concentració de sortida en les cel·les dessaladores en funció del temps d'operació s'il·lustren en la figura 12.

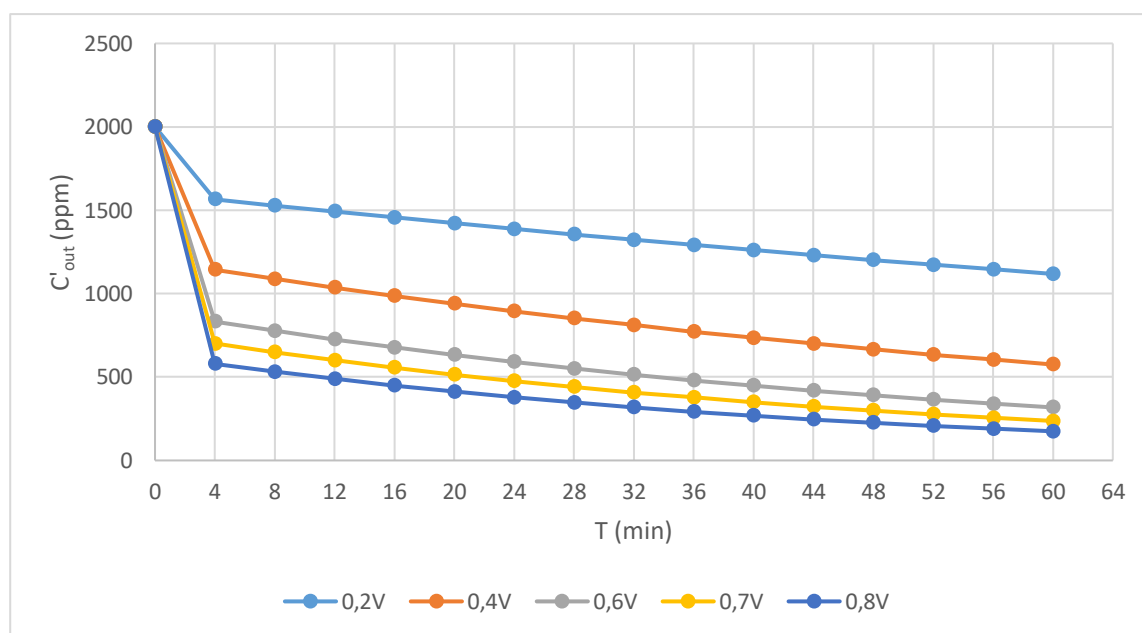


Figura12. Concentració de sortida de les cel·les dessaladores en funció del temps d'operació a diferents voltatges (2000 mg/L)

En la figura 12 s'observa com la concentració a la sortida de les cel·les dessaladores disminueix en funció del temps, s'observa com la concentració disminueix aproximadament un 50% quan el voltatge aplicat es de 0,8V. A voltatges més petits la reducció és més baixa, com per exemple per a un voltatge de 0,4V, la reducció en la concentració és d'aproximadament un 35%.

A mesura que es produeix la dessalinització, la concentració, independentment del voltatge que s'aplica, no disminueix en gran proporció, arribant a ser gairebé asimptòtic.

La intensitat de corrent en funció del temps i a diferents voltatges aplicats es representa a la figura 13.

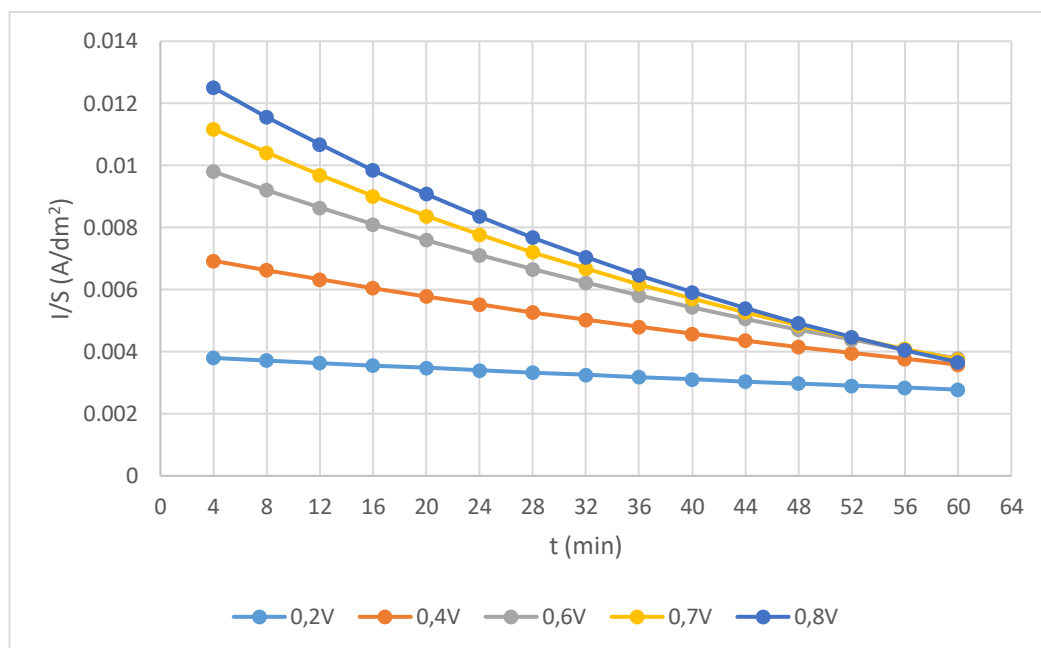


Figura13. Densitat de corrent en funció del temps d'operació a diferents voltatges (2000mg/L)

En la figura anterior, clarament s'observa que la densitat de corrent disminueix amb el temps asimptòticament.

El consum energètic es mostra en la figura 14.

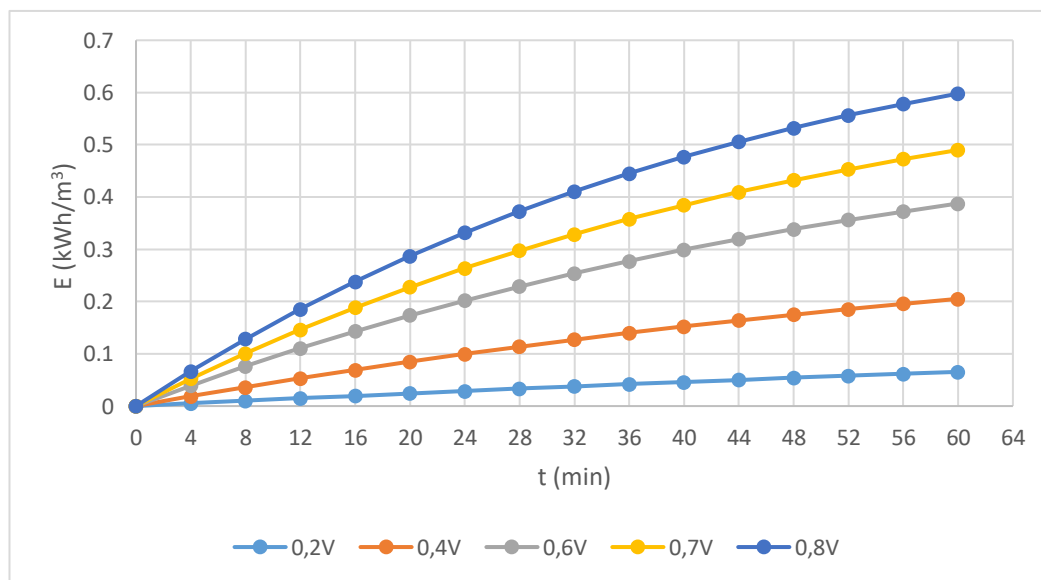


Figura14.. Consum energètic en funció del temps d'operació a diferents voltatges (2000mg/L)

Tenint en compte que a voltatges grans (0,8 V i 0,7 V) s'obté una aigua amb menys concentració de sal com s'ha pogut observar en la figura 12, a mesura que s'augmenta el voltatge de la cel·la, el consum energètic augmenta com ho corrobora la figura 14. A temps d'operació elevats, el consum s'incrementa.

6.3.2. Estudi de l'efecte de la concentració inicial

Després de realitzar la simulació amb una concentració d'entrada de 2000mg/L, és realitza la mateixa agafant com a concentració d'entrada 5000 mg/L i 10000mg/L, però a un mateix voltatge (0,4V). Els resultats obtinguts es representen a continuació. La figura 15 representa la concentració de sortida en funció del temps d'operació i a 0,4V.

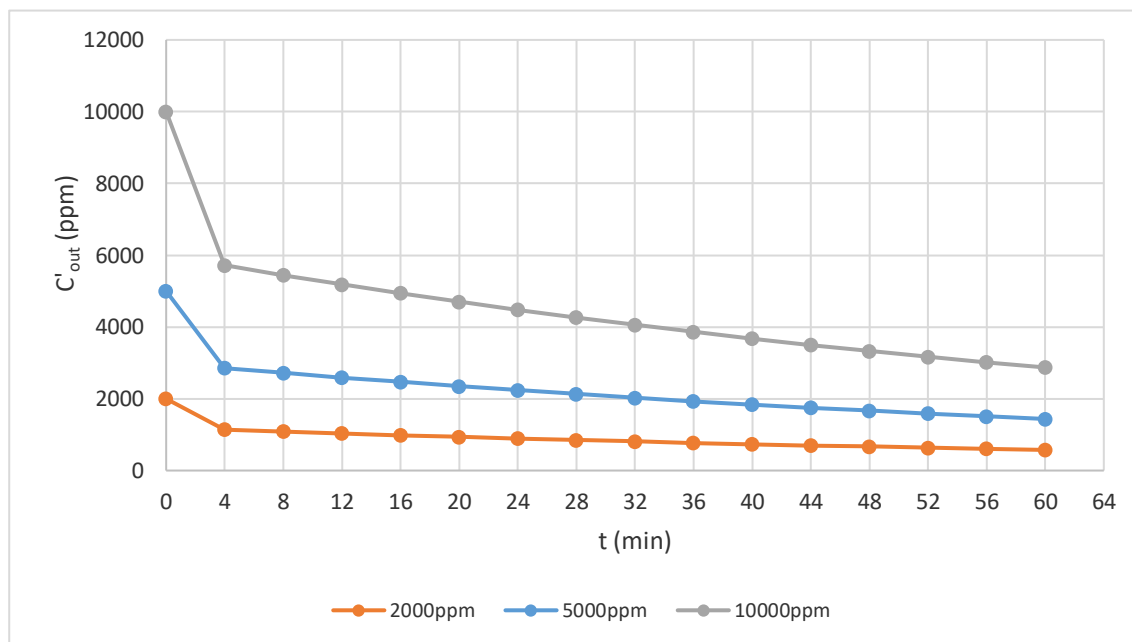


Figura15. Concentració de sortida de les cel·les dessaladores en funció del temps d'operació a 0,4V i a diferents concentracions d'entrada

En La figura 15 s'observa que a mesura que s'augmenta la concentració d'entrada, per un mateix voltatge de cel·la, la concentració de sal a la sortida del procés és major, en funció del temps.

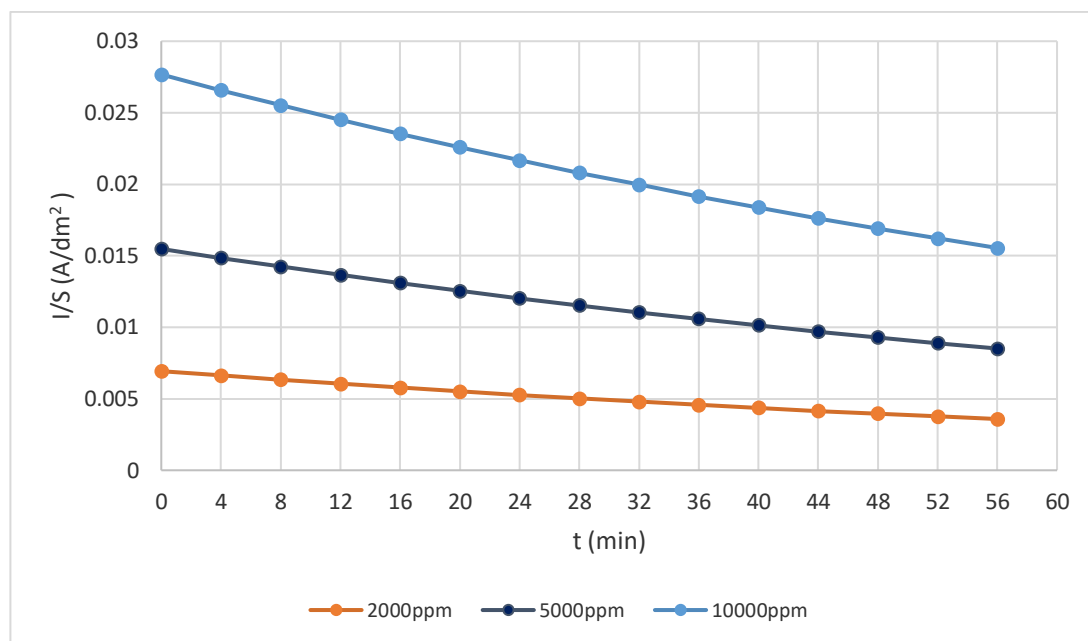
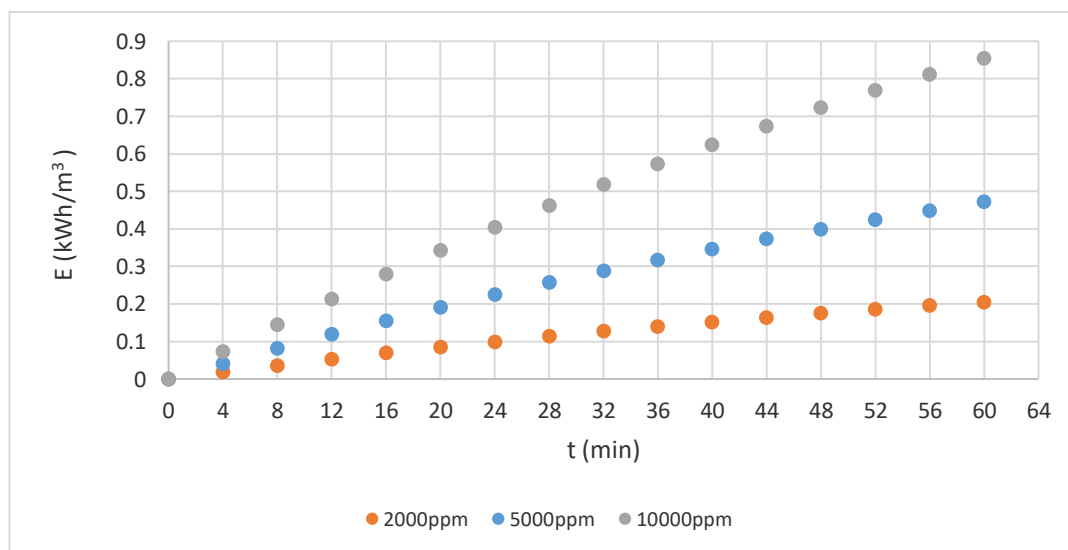


Figura 16. Densitat de corrent en funció del temps d'operació a 0,4V i a diferents concentracions d'entrada

A la figura 16 s'observa com la densitat de corrent disminueix en funció del temps, a mesura que es va dessalinitzant la dissolució i per tant, la concentració disminueix, la densitat de corrent a subministrar al final del procés ha de ser més petita que la de l'inici ($t=0$).



Gràfic 17. Consum energètic en funció del temps d'operació a 0,4V i a diferents concentracions d'entrada

Al gràfic 17 es pot observar com el consum energètic augmenta en funció del temps. Quan la concentració d'entrada es de 10000 mg/L es consumeix més energia que amb l'entrada d'una concentració de 2000mg/L, es degut a que el sistema requereix de més força impulsora per tal de moure la gran quantitat de ions.

6.4. Resultats del algoritme de dessalinització per la producció de sal a partir de salmorres de desolació deigua de mar mitjançant osmosi inversa.

Introduint en el algoritme de càlcul les especificacions i condicions de la taula 4 es realitza una simulació del procés de concentració de salmorres de desolació d'aigua de mar fent servir osmosi inversa. .

Taula 4. Especificacions i condicions d'operació. [2]

Especificació i condicions d'operació	
Gruix de les cel·les dessaladores i de concentració; a	0,043 cm
Amplada de les cel·les dessaladores i de concentració; b	10 cm
Llargada de les cel·les dessaladores i de concentració; l	100 cm
Gruix de la membrana de bescanvi catiónic: τ_K	0,018 cm
Gruix de la membrana de bescanvi aniònic: τ_A	0,015 cm
Velocitat a l'entrada de les cel·les dessaladores; u'_{in}	10,8 cm/s
Velocitat a l'entrada de les cel·les de concentració; u''_{in}	10,8 cm/s
Temperatura; T	25°C
Desviació estàndard de la distribució normal de la relació de la velocitat de la solució; σ	0,1
Distància entre varetes; x	0,1 cm
Angle de creuament de les varetes: θ	$\frac{\pi}{2} \text{ rad}$
Número de ranures en una cel·la dessaladora; n'	1

Número de ranures en una cel·la de concentració; n''	1
Ample de les ranures en les cel·les dessaladores; w'	3 cm
Ample de les ranures en les cel·les de concentració; w''	3 cm
Llargada de les ranures en les cel·les dessaladores; h'	2 cm
Llargada de les ranures en les cel·les de concentració; h''	2 cm
Número de parells de cel·les; N	50

El funcionament d'aquest algoritme es diferent als estudiats anteriorment. En aquest cas es simularà l'entrada al sistema d'una concentració de $69,36 \text{ g/dm}^3$ a 25°C i amb una densitat de corrent de 4 A/dm^2 , avaluant el sistema a diferents velocitats d'entrada tant en les cel·les dessaladores com de concentració ($u'_{in} = u''_{in}$). Els paràmetres a estudiar són la concentració a la sortida de les cel·les de concentració (C''_{NaCl}), el consum energètic (E) i la raó de dessalinització (α)

Es representen gràficament cada un d'aquests paràmetres:

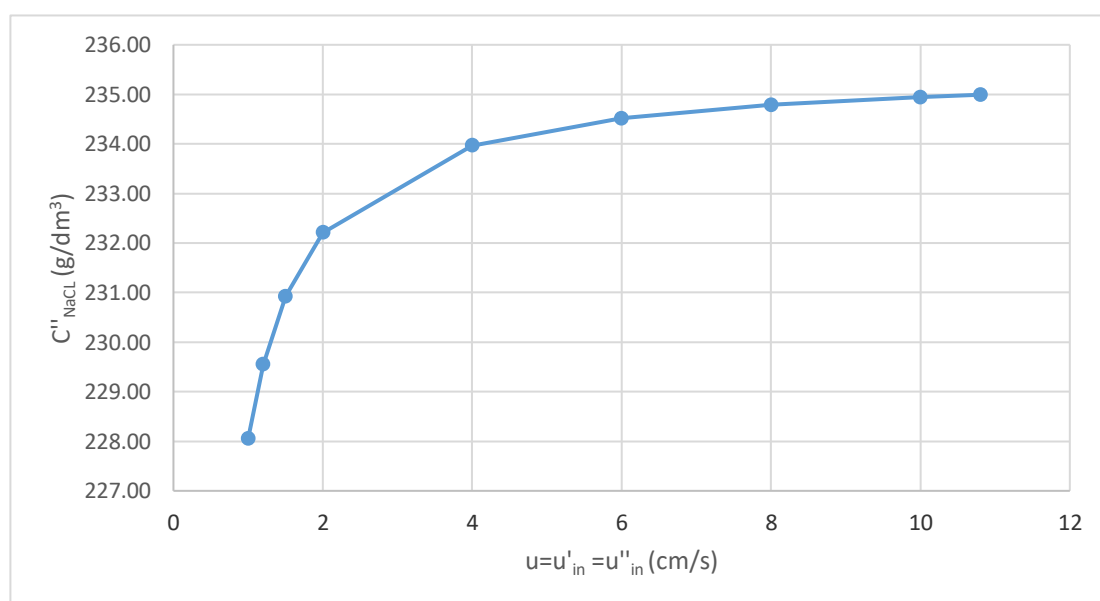


Figura18.. Concentració a la sortida de les cel·les de concentració en funció de la velocitat d'entrada

En la figura 18 podem observar com la concentració a la sortida de les cel·les de concentració augmenta en funció de la velocitat d'entrada té una trajectòria asimptòtica, a elevades velocitats d'entrada, el sistema es incapaç de concentrar més sal, al voltant de 235 g/dm^3 , per tant, si es vol reduir la concentració de salmorra és necessari operar a velocitats baixes d'entrada. Així doncs, s'obté

un corrent de concentrat amb una alta concentració de sal (producció de sal) i un corrent de diluït que es pot abocar al mar.

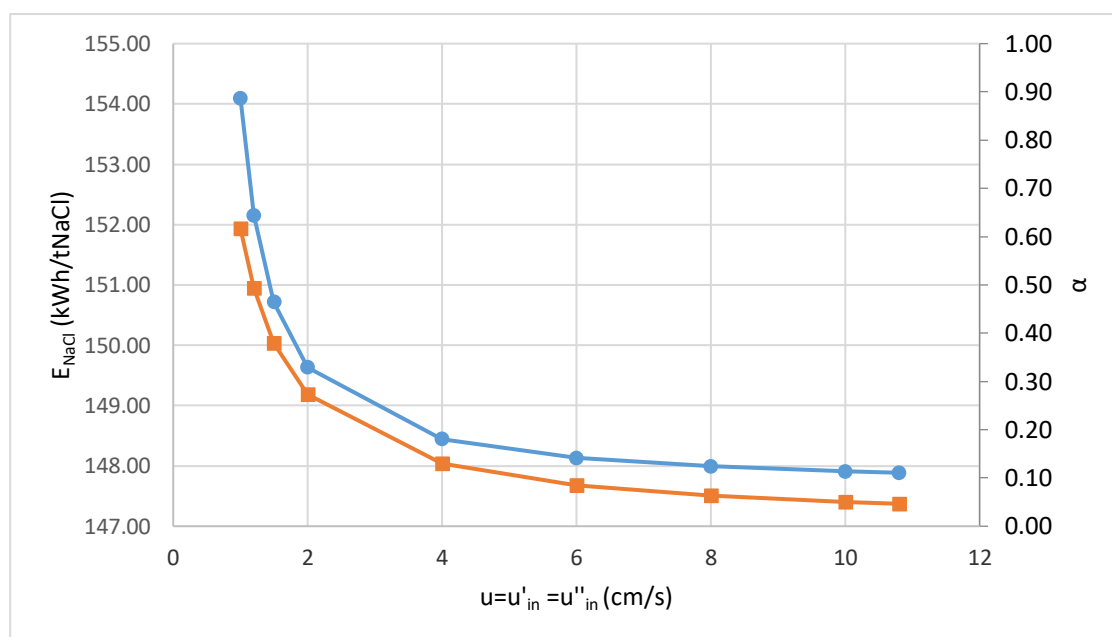


Figura19.. Consum energètic i raó de dessalinització en funció de la velocitat d'entrada

En la figura 19 on es representa el consum energètic, s'observa que té un comportament asintòtic en funció de la velocitat, el mateix passa també, amb la raó de dessalinització. Operant a velocitats baixes, la raó de dessalinització és troba al voltant de 0,5, el consum energètic és més baix com es representa en la figura 19 de aproximadament 150 kWh/tNaCl.

6.4.1. Comparació del resultats de la simulació amb dades experimentals

Amb l'objectiu de validar el funcionament d'aquesta simulació, es realitza una comparació amb dades experimentals obtingudes utilitzant les mateixes condicions d'operació amb les que s'ha realitzat la present simulació, aquestes es recullen en l'estudi titulat *"Computer simulation of ion-exchange membrane electrodialysis for salt concentration and reduction of RO discharged brine for salt production and marine environment conservation"* Aquestes dades van ser obtingudes per grup d'investigació R2EM dins del projecte de investigació Sostaqua [2].

Es simula el sistema a diferents intensitats de corrent i a diferents temperatures. A la taula 5 s'observen els diferents experiments realitzats:

Taula 5. Variació de la Intensitat de corrent i temperatura per a cada un dels experiments de concentració de salmorres de desolació d'aigua de mar per OI. [2]

No.	I/S (A/dm ²)	T (°C)
1	6	27
2	6	20
3	5	27

4	5	20
5	4,5	18
6	4	25
7	4	17
8	3,5	27
9	3	18
10	3	16

Les dades de evolució de la operació del procés de concentració en funció dels diferents paràmetres avaluats es mostren a les Figures 20 i 21.:

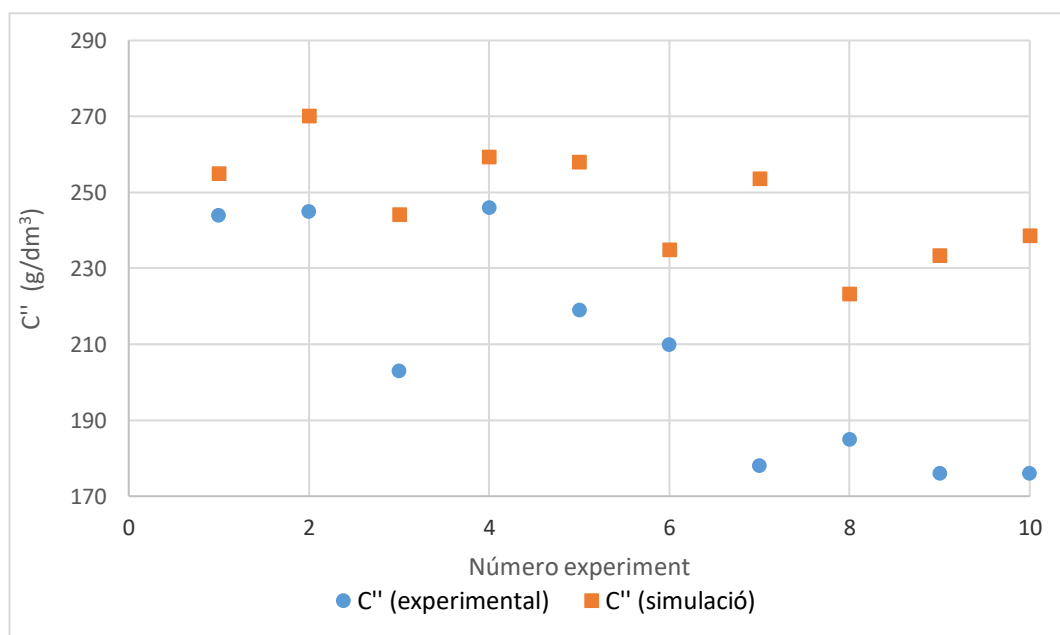


Figura20. Comparació entre valors de concntració experimental i de la simulació

En la figura 20, s'observa que la concentració de sal a la sortida, en la simulació, s'obtenen valors majors als obtinguts experimentalment.

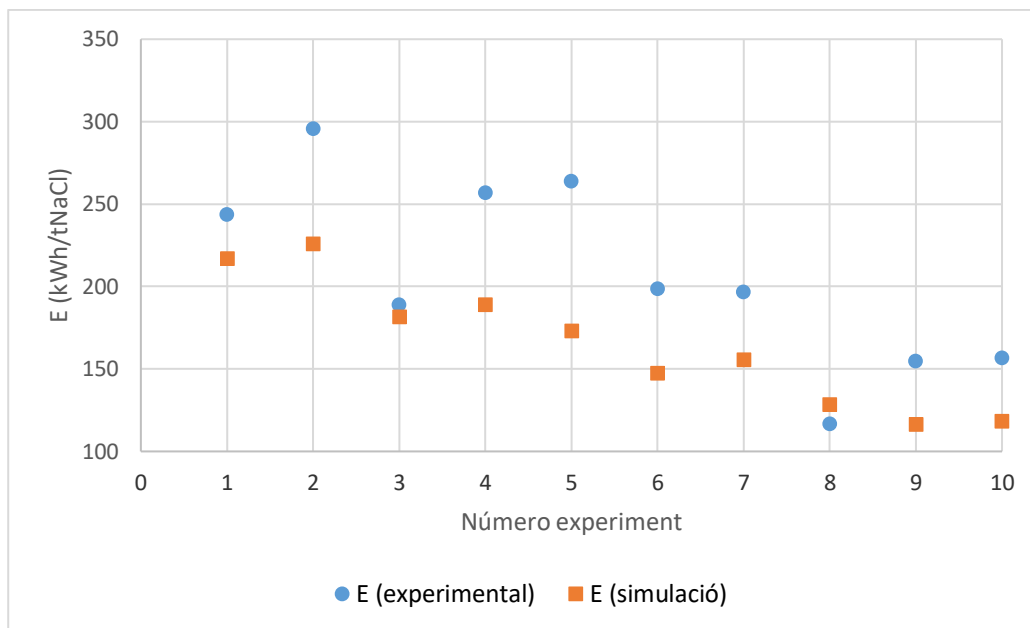


Figura21. Comparació entre valors de consum energètic experimental i de la simulació

El consum energètic representat en la figura 21, s'observa que amb la simulació s'obtenen consums menors als obtinguts experimentalment.

En els gràfics 20 i 21, la simulació descriu de manera poc precisa els valors experimentals, tot i tenir la mateixa tendència en ambdós estudis, de manera gràfica es pot observar que l'error comès en la simulació de cada un dels punts és elevat. Aquesta discrepància s'associa a algun error en la programació de la simulació.

Tot i la discrepància entre valors, la simulació pot predir el comportament de cada una de les condicions representades en la taula 5.

7. Estudi comparatiu de algorismes de simulació per les configuracions “Feed-and-Bleed” i “Batch”.

Tal com s'ha comentat amb anterioritat, el sistema *Feed-and-Bleed* i *Batch* treballen sobre el circuit de diluït, mentre que el sistema de concentració de salmorra i producció de sal treballa sobre el circuit de concentrat. En aquest cas, per tal d'aprofundir en les simulacions, es procedeix a realitzar una comparació dels resultats entre el sistema *Feed-and-bleed* i *Batch*.

Tenint en compte que el sistema *Feed-and-bleed*, permet reduir la concentració de sal fins a 400 mg/L independentment de la concentració a l'entrada, però depenent d'aquesta, el consum energètic varia com es pot observar en la taula. Prenent una concentració a l'entrada de 2000 mg/L, el consum energètic a 0,6V és de 0,5kWh/m³.

En canvi, en el sistema Batch, la concentració de sortida depèn directament dels paràmetres imposats en la simulació, com s'observa en la figura 15, la concentració de sortida passats 60 minuts, és inferior a 400 mg/L quan el voltatge aplicat és igual o superior a 6V. Observant la figura 17 i prenent com a referència 6V, s'observa que al cap de 60 minuts, el consum energètic és 0,4 kWh/m³.

Vist que els consums energètics són molt similars, prenent com a referència comparativa l'entrada d'una concentració de 2000 mg/L i amb un voltatge aplicat de 6V. La concentració a la sortida utilitzant el sistema Batch és major que 500 mg/L, en canvi utilitzant el sistema *Feed-and-bleed*, la concentració a la sortida és de 400mg/L.

Observant aquesta comparativa amb les diferents concentracions d'entrada estudiades prèviament i a diferents voltatge, s'obté la figura 22.

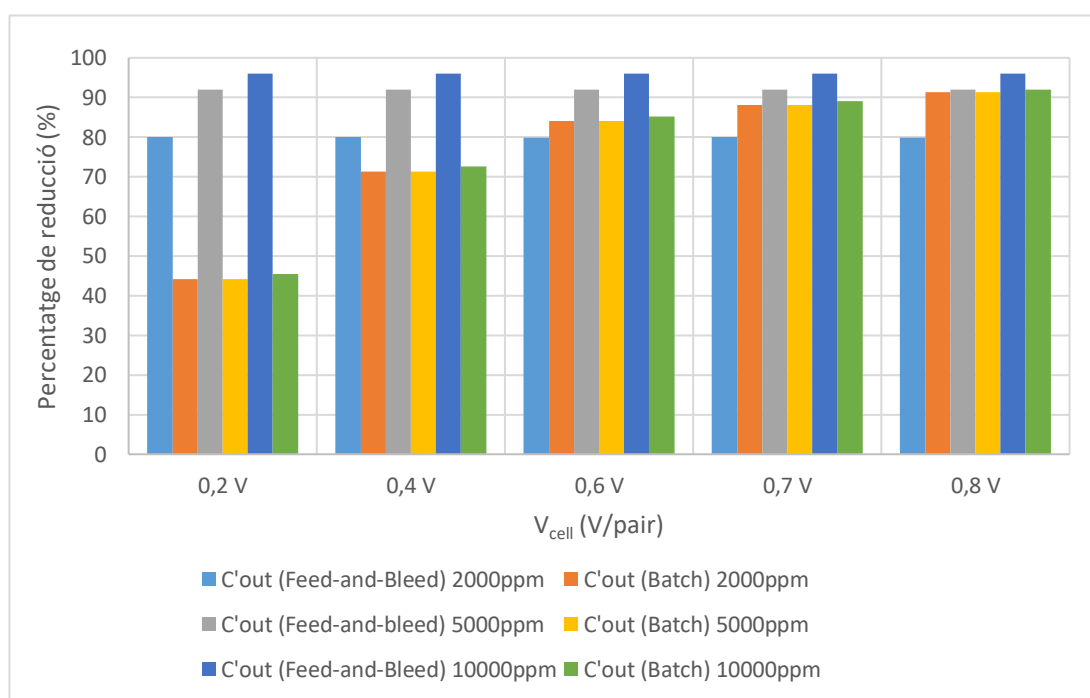


Figura22. Percentatges de reducció de la concentració de sal en funció del voltatge i concentració dels programes *Feed-and-Bleed* i *Batch* (a temps 60 min)

Com s'ha comentat amb anterioritat, el programa *Feed-and-Bleed* permet introduir una concentració objectiu, en aquest cas 400 mg/L que es tracta d'una concentració apta pel consum humà. Aleshores, independentment del voltatge aplicat i la concentració d'entrada, la reducció de la concentració de sal està al voltant del 90%.

Pel que fa al sistema Batch, els percentatges de reducció a voltatges de 0,2; 0,4 i 0,6V, al cap de 60 min, són inferiors al 90%. En canvi, a voltatges de 0,7V i 0,8 V, la reducció és generalment de 90% independentment de la concentració d'entrada.

8. Anàlisi de l'impacte ambiental del projecte: matriu de Leopold

En aquest projecte s'ha estudiat el procés de dessalinització d'aigües amb elevades salinitats mitjançant l'electrodiàlisi. En si mateix, aquest procés tracta de reduir l'impacte ambiental que suposa l'abocament de salmorres al medi natural, ja sigui en conques fluvials o al medi marí.

Per avaluar els impactes en el medi ambient determinats en aquest projecte, s'ha dissenyat una matriu d'identificació causa-efecte coneguda com *matriu de Leopold*. Aquestes matrius consisteixen en un quadre de doble entrada: a les columnes figuren els elements generadors d'impacte mediambiental, es a dir, les accions susceptibles de produir impactes, mentre que a les files es disposen els elements paisatgístics-ambientals potencialment receptors de les afeccions que provoquen les accions descrites. Les interaccions es representen amb el símbol X.[14]

Taula 6. Matriu de Leopold

Actuacions Paràmetres ambientals	Emissions	Transport general	Transformació del sòl	Accidents d'operació	Abocaments	Energia consumida	Transport de materials	Opinió pública	Contaminació acústica	Ocupació
Sòl										
Clima										
Paisatge	X									
Flora i fauna	X		X		X					
Aire										
Salut pública	X									
Soroll										
Sistema social-econòmic								X		
Recursos no renovables						X				
Aigua										

En definitiva, el procés estudiat té impactes positius des d'un punt de vista ambiental en multitud de variables. La reducció d'emissions i residus repercuteixen en el paisatge, la flora i fauna i en la salut pública. L'energia consumida es redueix, amb el que s'avança en l'ús renovable dels recursos. Finalment, l'opinió pública cap a les indústries químiques implicades en el procés, i a tot el sector químic en general, es veu notablement afavorida.

Amb aquest projecte final de carrera, es disposarà d'una eina útil amb el que fer front als objectius de qualsevol altre projecte, tant en la seva fase de disseny com en la seva etapa operativa, es disposarà

d'informació per a l'optimització del procés de dessalinització i la seva viabilitat en els diferents escenaris en els que es pretengui desenvolupar.

9. Conclusions i proposta de continuïtat

El model de dessalinització d'aigües amb elevades salinitats mitjançant ED que s'ha presentat al llarg de la memòria compren els principals fenòmens de transferència de massa que tenen lloc dins del *stack*, així com l'estudi del consum energètic requerit per a cada una de les simulacions. Tot i la extrema complexitat dels processos que es plantegen, s'han realitzat les simulacions pertinents tenint en compte diferents configuracions, com single-pass, Feed-and-Bleed i batch. Aquestes configuracions són les més utilitzades en aplicacions industrials.

D'acord amb la gran quantitat de paràmetres analitzables del procés de dessalinització, en aquest projecte s'han estudiat el més representatiu, com poden ser fonamentalment, la concentració a la sortida del *stack* de ED, el consum energètic i els diferents fluxos que es produeixen a través de les membranes de bescanvi iònic.

En les quatre simulacions realitzades, que descriuen quatre configuracions diferents, s'han obtingut resultats amb tendència similars, pel que fa a un augment de la concentració d'entrada, s'ha pogut analitzar, que a majors concentracions de clorur de sodi d'entrada, un major flux d'ions sodi i clorur i de d'aigua travessen les membranes de bescanvi iònic, també, s'obté un consum energètic major. Al augmentar el voltatge, s'obté una dissolució amb menys concentració de sals, però un consum energètic més elevat. Pel que fa al temps d'operació en el cas de la dessalinització Batch, s'ha obtingut que a temps d'operació elevat, s'obté un corrent amb un 50% de reducció de sal respecte l'entrada comparat amb el cas de Feed-and-Bleed, s'obtenen resultats similars en quan a consum energètic i concentració de sortida.

En quan a una possible continuació d'aquest treball on el model es en una dimensió (1D) és la implementació de les simulacions realitzades per descriure el procés de transport en dos o tres dimensions (2D i 3D) requeriran eines de simulació com COMSOL Multiphysics. Així es podria realitzar l'estudi i la computació dels sistemes de manera més ràpida i completa. També seria interessant realitzar l'optimització del procés de dessalinització mitjançant ED.

10. Pressupost i anàlisi econòmic

L'avaluació econòmica del projecte s'ha realitzat tenint en compte els següents costos referents als recursos materials i humans.

10.1. Recursos materials

En aquest apartat es comptabilitzen els costos relacionats amb el material informàtic corresponent al ordinador portàtil utilitzat i el material d'oficina en general, es representa a la taula 7.

Taula 7. Detall dels costs de la partida de recursos materials

Recursos materials	Cost [€]
Material informàtic	1.500
Material de papereria	200
	TOTAL 1.700

Els recursos de documentació de revistes han estat a disposició com a part dels serveis proporcionats per la universitat mitjançant el pagament de la matrícula del alumne.

10.2. Recursos humans

Per l'elaboració del present projecte s'ha requerit la intervenció, a més del propi autor, del director del projecte i un co-director. Així, per calcular els costos de personal s'ha contemplat el salari de cada un d'ells.

El *XV Conveni general de l'indústria química* defineix vuit grups professionals (BOE núm. 191 (08/08/18), Resolució de 26 de Juliol de 2018)[10]. A continuació es citen les definicions dels grups professionals als que pertanyen el personal involucrat en el projecte:

- Grup professional 5: Es defineix a tot treballador amb funcions d'integrar, coordinar i supervisar l'execució de diverses tasques homogènies amb la responsabilitat d'ordenar el treball d'un conjunt de col·laboradors, incloent a més a més la realització de les tasques que, encara sense implicar ordenació de treball, tenen un contingut mitjà d'activitat intel·lectual i de relacions humanes. En aquest grup professional s'inclou l'autor del projecte [10].

- Grup professional 8: Es defineix a tot treballador que maneja un alt grau d'autonomia, coneixements professionals i responsabilitats que exerceix sobre un o varis sectors de l'empresa. Es tracta de personal amb una dilatada experiència professional que s'encarrega de dirigir un conjunt de funcions que comporten una activitat tècnica o professional especialitzada. Per tant, en aquest grup s'inclou al director i co-director del projecte [10].

Aproximadament, el salari mínim brut anual i per hora per cada un d'aquests grups es troba tabulat en la taula 18 (actualitzat a 2020):

Taula 8. Sou mínim brut per els diferents grups professionals. Font. [10]

Grup professional	Sou [€/h·personal]]
5	12
8	80

El cost de personal d'aquest projecte es determina tenint en compte les hores invertides per el projectista i els directors del projecte. S'estableix que el temps invertit per un enginyer al realitzar aquest projecte es la de una jornada laboral de vuit hores, durant 4 mesos. El temps invertit pel tutor del projecte s'estima en trenta hores. Amb aquesta informació es procedeix a calcular el cost de personal. Els resultats es recullen en la taula 9.

Taula 9. Detall del cost de la partida de recursos humans

Recursos humans	Nº de persones	Hores de treball [h/persona]	Sou [€/ (h·personal)]	Cost [€]
Projectista	1	640	12	7.680
Director	2	30	80	4.800
			TOTAL	12.480

10.3. Cost total

El cost global del projecte es calcula sumant el total de les partides de recursos materials i recursos humans. El resultat es presenta en la taula 20.

Taula 10. Càlcul del cost total del projecte

Partida	Cost [€]
Recursos materials	1.700
Recursos humans	12.480
	TOTAL 14.180

El cost total del projecte es de CATORZE-MIL CENT-VUITANTA euros (14.180€)

11. Bibliografia

- [1] GERMÁN, DÉVORA-ISIORDIA, E. GONZÁLEZ, Evaluación de procesos de desalinización y su desarrollo en México. 2010
- [2] TANAKA Y, REIG M, CASAS S, ALADJEM C, CORTINA J. Computer simulation of ion-exchange membrane electrodialysis for salt concentration and reduction of RO discharged brine for salt production and marine environment conservation. Journal: Desalination, 2015, vol 367 pp: 76-89
- [3] STEVE TARLETON, Progress in Filtration and Separation, Department of Chemical Engineering, 2010, vol 12
- [4] H.T. EL DESSOUKY, H.M ETTOUNEY. Fundamentals of Salt Water Desalination, 2008
- [5] YOSHINOBU TANAKA. Ion Exchange Membranes: Fundamentals and Applications, 2006
- [6] YOSHINOBU TANAKA. Development of a computer simulation program of feed-and-bleed ion-exchange membrane electrodialysis for saline water desalination, Desalination, 2014 vol 342 pp 30-231
- [7] CLAYTON R. Review of Current Knowledge Desalination for Water Supply page image Thames Water Utilities Ltd. Review of Current Knowledge, 2015
- [8] KRISHNA H. Introduction to Desalination Technologies, pàgines 11-68
- [9] YOSHINOBU TANAKA. Saline Water Desalination with Single-pass Ion-Exchange Membrane Electrodialysis Computer Simulation
- [10] Ministerio de Trabajo, Migraciones y Seguridad Social. Resolución de 26 de julio de 2018, de la Dirección General de Trabajo, BOE, núm 191, 8 de agosto de 2018, pàgines 80030 a 80159
- [11] University of South Carolina Research Foundation. Zero Discharge Seawater Desalination: Integrating the Production of Freshwater, Salt, Magnesium and Bromine. Bureau of Reclamation, 2006.
- [12] TANAKA Y. A computer simulation of ion exchange membrane electrodialysis for concentration of seawater. Membrane Water Treatment 1, 2010, p. 13-37.
- [13] TANAKA Y. Mass transport and energy consumption in ion-exchange membrane electrodialysis of seawater. Journal of Membrane Science 215, 2003, p. 265-279.

[14] GOURBE M. Evaluación de la reutilización de residuos salinos en la industria cloroálcali. 2004

Proyecto Final de Carrera dirigido por J.L. Ochando, UPC, 2007.

[15] Richard W. Baker. Membrane Technology and Applications, Second Edition, 15 March 2004.

